

Beitrag zur NO_x - Simulation eines Ottomotors im Instationärbetrieb

Vom Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt
zur
Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Daniel Sabathil

aus Seeheim-Jugenheim

Berichterstatter:	Prof. Dr.techn. C. Beidl
Mitberichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. U. Spicher
Tag der Einreichung:	26.01.2010
Tag der mündlichen Prüfung:	06.05.2010

D17
Darmstadt 2010

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Verbrennungskraftmaschinen an der Technischen Universität Darmstadt. Die Anregung zum Thema dieser Arbeit verdanke ich Herrn Prof. G. Hohenberg. Mit seiner ständigen Bereitschaft, die Ergebnisse dieser Arbeit ausführlich und kritisch zu diskutieren, hat er wesentlich zum guten Gelingen der Arbeit beigetragen. Für die harmonische Zusammenarbeit und sein Vertrauen während dieses schönen Lebensabschnitts möchte ich mich herzlich bedanken.

Ebenso gilt mein dank Herrn Prof. Dr. techn. C. Beidl, der im Oktober 2008 die Leitung des Fachgebiets Verbrennungskraftmaschinen von Prof. Hohenberg übernommen hat, für die Übernahme des Referats dieser Arbeit. Er hat mich mit vielen wertvollen Anregungen bei der Ausfertigung dieser Arbeit unterstützt. Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. U. Spicher möchte ich mich für die Übernahme des Korreferates und der damit verbundenen Mühe bedanken.

Meinen Kollegen am Fachgebiet danke ich für die überaus gute Zusammenarbeit und die angenehme Arbeitsatmosphäre. Ein großer Dank gilt auch den vielen Studentinnen und Studenten, die einen großen Beitrag zur vorliegenden Arbeit geleistet haben.

Mein Dank gilt weiterhin meinen Eltern sowie meiner Freundin Stephanie Frank für die Unterstützung während dieser Zeit.

Abschließend möchte ich mich bei allen Mitarbeitern der fachgebietseigenen Werkstatt sowie der Elektronikwerkstatt bedanken, die zur erfolgreichen Durchführung der experimentellen Untersuchungen beigetragen haben.

Hiermit versichere ich, die vorliegende Doktorarbeit unter der Betreuung von Prof. Dr. techn C. Beidl nur mit den angegebenen Hilfsmitteln selbständig angefertigt zu haben.

Darmstadt, den 26.01.2010

Inhaltsverzeichnis

1. Motivation und Ziel	1
1.1. Einleitung	1
1.2. Motivation	3
1.3. Ziel	5
2. Grundlagen	7
2.0.1. Stickstoffmonoxid NO	8
2.0.2. Stickstoffdioxid NO_2	9
2.1. Stickoxidbildung	9
2.1.1. Thermisches NO (Zeldovic Mechanismus)	10
2.1.2. Prompte NO -Bildung (Fenimore NO)	13
2.1.3. Brennstoff NO	13
2.1.4. Stickstoffdioxidbildung NO_2	14
2.2. Modellbildung von Stickoxidemissionen	14
2.2.1. Modellbildung	14
2.2.2. Überblick Thermochemische Modelle	16
2.2.3. Überblick Empirische Modelle	20
3. Messtechnik & Auswertung	25
3.1. Zylinderdruckindizierung	25
3.1.1. Messtechnik	25
3.1.2. Nulllinienfindung	27
3.1.3. Verbrennungsverlauf	29
3.1.4. Eigenschaften des Arbeitsgases	32
3.2. Abgasanalyse	40
3.2.1. Stationäre Abgasanalyse	40
3.2.2. Dynamische Abgasanalyse	40
4. Reaktionskinetische Stickoxidmodellierung	43
4.1. Reaktionskinetik und chemisches Gleichgewicht	43

4.2. Thermodynamik	63
4.2.1. Zwei-Zonen-Modell	63
4.2.2. Temperaturverlauf der verbrannten Zone	67
4.2.3. Adiabate Verbrennungstemperatur	70
4.2.4. Restgasgehalt	70
5. Das empirische Stickoxidmodell	74
5.1. Gestaltung des Modells	74
5.2. Einflussgrößen und Modellparameter	75
5.2.1. Verbrennungsschwerpunkt und Brenndauer	79
5.2.2. Drehzahl	86
5.2.3. Lambdavariation	89
5.2.4. Frischladungsmasse	92
5.2.5. Inertgas	92
5.2.6. Luftfeuchte	95
5.2.7. Ladungstemperatur	96
5.3. Statistische Modellbildung	96
5.3.1. Kenngrößen der Statistik	96
5.4. Das Polynomiale Echtzeitmodell	98
5.4.1. Parameterauswahl	98
5.4.2. Einfachmodell	99
5.4.3. Hauptmodell	102
5.4.4. Erweitertes Hauptmodell	106
5.5. Das empirische Stickoxidmodell im dynamischen Motorbetrieb	110
6. Zusammenfassung und Ausblick	112
A. Anhang	113
A.1. Prüfstands Aufbau	113
A.1.1. Versuchsträger und Messtechnikanordnung	113
A.1.2. Prüfstandstechnik	119
A.2. Gleichgewichtsrechnung - verbrannte Zone	122
Abkürzungsverzeichnis	133

1. Motivation und Ziel

1.1. Einleitung

In unserer zunehmend technisierten Welt hat die Menschheit seit jeher das Bestreben gehabt, die notwendige körperliche Arbeit zur Erlangung individueller Ziele auf ein notwendiges Minimum zu reduzieren.

Hierfür wurden im Rahmen der menschlichen Evolutionsgeschichte eine Vielzahl von Werkzeugen und Vorrichtungen ersonnen, die unter Ausnutzung meist mechanischer Gesetzmäßigkeiten die Überwindung von Hindernissen erleichterten. Hierbei ging die geleistete Arbeit jedoch immer von Mensch oder Tier aus.

Erst mit dem Beginn der industriellen Revolution im 18. Jahrhundert kam es zu einer Verlagerung der Quelle Arbeit, weg von Lebewesen hin zu technischen Gerätschaften.

Die Entdeckung des Feuers lässt sich zwar schon bis in sehr frühe Abschnitte der Menschheitsgeschichte zurückverfolgen, die verbreitete Ausnutzung der thermischen Energie zur Gewinnung von Arbeit jedoch begann erst im 18. Jahrhundert mit der Entwicklung der Dampfmaschine.

Von diesem Zeitpunkt an kam es zu einer stetigen Weiterentwicklung der Arbeitsmaschinen hinsichtlich Leistungsdichte und Effizienz. Als Energiequelle dienten bis heute fast ausschließlich fossile Brennstoffe.

Erst in der Mitte des 20. Jahrhunderts kam ein weiteres bedeutendes Entwicklungsziel hinzu - die Umweltverträglichkeit. Die Veränderungen der Umwelt unseres Planeten wird häufig anthropogenen Emissionen von Schadstoff- und Treibhausgasen der vergangenen 2 Jahrhunderte zugeschrieben.

Diese Entwicklung führte schließlich zu gesetzlichen Anforderungen bezüglich der Umweltverträglichkeit von Arbeitsmaschinen aller Art.

Als Energiequelle von thermischen Arbeitsmaschinen werden bis zum heutigen Tage in der Regel fossile Brennstoffe herangezogen. Die Verbrennung fossiler Brennstoffe führt im Wesentlichen in Abhängigkeit der Prozessführung zu Emissionen von:

- Kohlendioxid
- Kohlenmonoxid
- Kohlenwasserstoffen
- Wasser
- Stickoxiden
- Partikeln

Hierbei werden emittierte Kohlenmonoxide, Kohlenwasserstoffe, Stickoxide sowie Partikel als Schadstoffe betrachtet, die auf den Menschen eine toxische bzw. schädliche Wirkung ausüben [Kol90].

Kohlendioxid hat keine direkte gesundheitsgefährdende Wirkung. Dennoch ist es Ziel vieler Nationen, die Emission dieses Gases ebenfalls einzuschränken, da ihm nachgesagt wird zur Klimaerwärmung beizutragen [SGW⁺06].

Kohlenmonoxid dagegen stellt aufgrund seiner toxischen Wirkungsweise eine direkte Gefährdung aller luftatmenden Lebewesen dar. Die Bindung von Kohlenmonoxid an das Hämoglobin und die damit verbundene Schädigung unterbindet den Sauerstofftransport und kann zur Erstickung führen. Des Weiteren gilt es als krebserregend, erbgutverändernd und fortpflanzungsgefährdend [Lin02].

Stickoxide sind ein Sammelbegriff für eine Vielzahl von Oxiden des in der Atmosphäre zu 79% vorhandenen Stickstoffs.

Schädlich für Mensch und Umwelt ist in erster Linie nur Stickstoffdioxid. Stickstoffmonoxid gilt als weniger schädlich und wird seiner gefäßerweiternden Wirkung wegen in der Medizin eingesetzt.

Dennoch gehört Stickstoffmonoxid zu den gesetzlich limitierten Schadstoffen, da es bei längerer Einwirkung der Atmosphäre zur Stickstoffdioxid weiteroxidiert. Stickstoffdioxid kann zu Schädigung der Atmungsorgane von luftatmenden Lebewesen sowie zur Blattschädigung von Pflanzen führen [Kol90].

1.2. Motivation

Das Abgasverhalten von Dieselfahrzeugen ist aufgrund fehlender wirkungsvoller Abgasnachbehandlung wesentlich kritischer [Hoh07a] als dies für stöchiometrische Ottomotoren der Fall ist. Eine Abgasnachbehandlung für Dieselmotoren in Bezug auf Stickoxide existiert erst seit kurzem [BSB⁺07].

Um die NO_x-Rohemissionen von Dieselmotoren zu senken, können die Betriebsparameter entsprechend angepasst werden, so dass es zu einer Senkung der NO_x Konzentration im Abgas kommt.

Hierzu könne die in Entwicklung befindlichen Zylinderdrucksensoren genutzt werden, die als hochintegrierte Geräte Bestandteile der Glühkerzen sind [BHH⁺04].

Die Messung des Zylinderdruckverlaufs erlaubt, mit Hilfe eines Stickoxidmodells die aktuelle Stickoxidemission der Verbrennungskraftmaschine zu errechnen und bei Bedarf die Betriebsparameter zu ändern. Daneben bietet die Messung des Zylinderdrucksignals direkt oder indirekt folgende Vorteile [BHH⁺04],[Lar05],[Jes02]:

- Reduzierung notwendiger Kennfelder
- Verbrennungsgeräuschregelung
- Aufladeregulung
- Abgasrückführregelung

Nun ist es naheliegend, auch für Ottomotoren ein solches echtzeitfähiges Modell zu erarbeiten mit dem Ziel, in folgende Anwendungen integrierbar zu sein.

1. Die Vorhersage von NO Rohemissionen

- als OnBoard Funktion von Motorsteuergeräten
- als Modul von Simulationssoftware zur Gesamtfahrzeugsimulation

2. Die Überprüfung von NO Rohemissionen als Diagnosewerkzeug z.B. an Motorenprüfständen

Für einen Ottomotor genügt die Betrachtung der Stickstoffmonoxidkonzentration (NO).

Während der motorischen Verbrennung ($\leq 650^\circ\text{C}$) wird ausschließlich NO erzeugt. Der Arbeitsbereich eines Ottomotors (homogenes, stöchiometrisches Gemisch) führt zu verschwindend geringen Stickstoffdioxidkonzentrationen im Abgas.

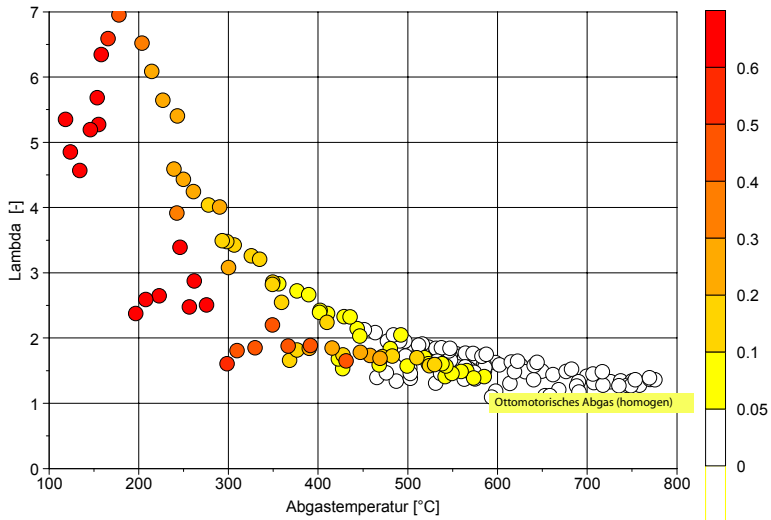


Abbildung 1.1.: Relativer Anteil von NO_2 an NO_x über Abgastemperatur und Lambda

NO_2 wird vorwiegend im kalten, sauerstoffreichen Abgasen von Dieselmotoren nachgewiesen. In 1.1 ist der relative Anteil von NO_2 an der NO_x Konzentration des Abgases eines Dieselmotors dargestellt. Die Färbung der Punkte gibt den NO_2 -Anteil an der Gesamt NO_x -Konzentration an. Rote Punkte haben einen relativen NO_2 -Anteil bis zu 60%, weiße Punkte hingegen 0%. Im Temperatur- und Lambdabereich der ottomotorischen Verbrennung geht der Anteil von NO_2 gegen 0%.

Die Anforderung an ein Modell, dass die Stickstoffmonoxidkonzentration eines Ottomotors abbildet, verlangt nach einem weiten Einsatzbereich sowie einer geringen Rechenzeit, um der Echtzeitfähigkeit gerecht zu werden.

Brandt hat in [Bra05] gezeigt, dass eine direkte Simulation mittels reaktionskinetischer Zusammenhänge bei Verwendung eines modernen PCs möglich ist.

Er gibt an, die Ergebnisse mit dem Verzug eines Verbrennungszyklus errechnen zu können. Dies stellt zwar eine ausreichend hohe Geschwindigkeit dar, ist jedoch für die angestrebten Einsatzgebiete einer echtzeitfähigen Simulation noch zu aufwendig. Für den Teilbereich einer Gesamtmotorsimulation kann nicht exklusiv die Rechenkapazität eines PC's zur Verfügung gestellt werden.

Darüber hinaus zeigt sich in verschiedenen Arbeiten [Nit92],[Gär01],[Web01], dass die Berechnung von Stickstoffmonoxid mittels reaktionskinetischem Modell auf Probleme in der Handhabbarkeit stößt.

Bereits Unsicherheiten in der Auswahl der Reaktionskonstanten oder von Eingangsgrößen wie der Ladungsmasse oder Inertgasgehalt können, wie später in der Arbeit gezeigt wird, schon zu großen Verschiebungen im Modellausgang führen.

1.3. Ziel

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, für Ottomotoren ein echtzeitfähiges Stickoxidmodell zu erarbeiten, das anhand von Daten aus der Hochdruck-

indizierung, Betriebsparametern sowie Betriebsrandbedingungen des Motors die Stickoxidemission des Verbrennungsmotors vorhersagen kann.

Im Verlauf der Arbeit werden zunächst mit Hilfe der physikalischen Chemie sowie experimentellen Untersuchungen die Haupteinflussparameter auf die Stickoxidbildung erarbeitet.

Eine rein empirische Untersuchung ist hier nicht zielführend, da sich ein „Ceteris paribus“ Vorgehen für alle relevanten Parameter am Motorprüfstand nicht verwirklichen lässt und so das Verständnis der physikalisch chemischen Zusammenhänge nicht klar herausgearbeitet werden kann.

Dennoch sollen diese Simulationen mit Messergebnissen untermauert werden, da die reaktionskinetische Simulation von der Modellbildung des Temperaturverlaufs der Reaktionszone bis hin zu Annahmen, die für den Restgasgehalt getroffen werden müssen, Unsicherheiten enthält, die, wie später noch gezeigt wird, das Ergebnis beträchtlich verändern können.

Bisherige Ansätze zur Ermittlung der Stickoxidemissionen an Verbrennungsmotoren gehen von einer rein thermischen NO-Bildung im „post-flame“ Bereich aus. Dieses Vorgehen lässt jedoch nur eine Berechnung von ca. 90-95% der Emissionen zu, da die chemischen Vorgänge innerhalb der Flammenfront sich von denen im „post-flame“-Bereich unterscheiden.

Darüber hinaus wird die thermische Stickoxidbildung ohne eine Anpassung an die Messergebnisse gerechnet, indem eine an die Randbedingungen angepasste Flammentemperatur zur Berechnung herangezogen wird. Dieses Verfahren hat sich bereits bei der Ermittlung der Stickoxidemissionen an einem Nfz-Dieselmotor bewährt [Gär01].

2. Grundlagen

Als Stickoxide wird eine Gruppe von chemischen Verbindungen aus Stickstoff und Sauerstoff bezeichnet, die in unterschiedlichen Atomverhältnissen vorliegen. Insgesamt sind acht verschiedene Oxide des Stickstoffs bekannt [Kol90].

- N_2O Distickstoffmonoxid (Lachgas)
- NO Stickstoffmonoxid
- N_2O_3 Distickstofftrioxid
- NO_2 Stickstoffdioxid
- N_2O_4 Distickstofftetroxid
- N_2O_5 Distickstoffpentoxid
- NO_3 Stickstofftrioxid
- N_2O_6 Distickstoffhexoxid

Für die motorische Verbrennung sind im Wesentlichen das NO (Stickstoffmonoxid) sowie NO_2 (Stickstoffdioxid) von Bedeutung. Diese beiden Stoffe sollen im Folgenden näher beleuchtet werden. Die Summe beider Gase als Gemisch wird mit NO_x (Stickoxid) bezeichnet. Die Zusammenfassung kann erfolgen, da NO in der Atmosphäre zu NO_2 aufoxidiert wird.

Als Folgeprodukte der Emission von Stickoxiden entstehen während der Transmissionsphase, dem Transport bei eingeschlossenen chemischen und physikalischen Umwandlungsprozessen, folgende Produkte [Kol90]:

- salpetrige Säure und Nitrite
- Salpetersäure und Nitrate

- Ozon, Alkyl- und Peroxyacylnitrate

Damit wird deutlich, dass unter anderem Stickoxide zu den Auslösern des photochemischen Smogs sowie des sauren Regens gehören [Kol90].

Darüber hinaus tragen Stickoxide innerhalb von chemischen Kettenreaktionen in der Stratosphäre zum Abbau von Ozon bei. Die als Lachgas bekannte Verbindung Distickstoffmonoxid wird als Treibhausgas eingestuft. Hierbei entspricht die Wirkung als Treibhausgas 296 mal der von CO_2 . Hauptemittent ist hier jedoch die Landwirtschaft [Kol90].

Die ersten gesetzlichen Beschränkungen für die Emission von Stickoxiden gibt es seit 1969.

In Kalifornien wurde am 4.12.1969 ein Gesetz erlassen, das die Emission von Stickstoffdioxid von Industrieanlagen auf 63,6 kg/h beschränkte. Deutschland folgte erst viel später. Am 1.7.1983 wurden in Deutschland zum ersten mal Grenzwerte für gasbefeuerte Anlagen eingeführt [Kol90].

2.0.1. Stickstoffmonoxid NO

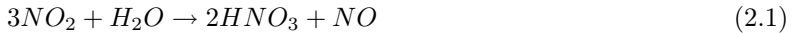
Stickstoffmonoxid ist ein farb-, geschmacks- und geruchsneutrales Gas mit geringer Wasserlöslichkeit. Es entsteht bei fast allen Verbrennungen fossiler Brennstoffe mit Luft und ist als emissionslimitierter Schadstoff eingestuft, obgleich es für Lebewesen in geringen Konzentrationen wenig schädlich ist.

In der Humanmedizin kann es seiner gefäßerweiternden Eigenschaften wegen zur Behandlung von Herz-/ Gefäßkrankheiten eingesetzt werden [Kol90], [Wag99], [Gär01].

Stickstoffmonoxid wird in der Atmosphäre vollständig zu Stickstoffdioxid autoxydiert. Die dafür angegebenen Zeiträume schwanken im Bereich von Stunden. Daher ist das längerfristige Schädigungspotential dem von Stickstoffdioxid gleichzusetzen und wird durch die Summenbildung der Emissionslimitierung ebenso behandelt [Kol90], [WMD01].

2.0.2. Stickstoffdioxid NO_2

Stickstoffdioxid ist ein rotbraunes bis violettes Gas mit einem stechenden, ozon- bis chlorartigen Geruch. Die Löslichkeit liegt weit über dem von NO . Mit Wasser reagiert es zu Salpetersäure (HNO_3) und NO [Kol90].



Die Wirkung auf den Menschen besteht im Wesentlichen aus der Schädigung der Atemwege. Als besonders anfällig gelten Menschen, die wie z.B. Asthmatiker unter einer Vorschädigung der Atemwege leiden.

Daneben ist das Gas selbst, wenn auch nicht in gleichem Umfang wie Schwefeldioxid, aufgrund seiner phytotoxischen Eigenschaft für die Vegetation schädlich. Daher gelten Stickoxide als pflanzenschädlich [Kol90].

Neben der direkten toxischen Wirkung auf Lebewesen sei nochmals auf die oben bereits näher eingegangenen Folgen in der Erdatmosphäre hingewiesen.

2.1. Stickoxidbildung

Die Bildung von Stickoxiden lässt sich in 4 wesentliche Mechanismen gliedern. Bemerkenswert dabei ist, dass aus dem in der Atmosphäre zu 79% vorhandenen Luftstickstoff während der Feuerung überwiegend NO gebildet wird.

- Thermisches NO
- Promptes NO
- Brennstoff NO
- Über N_2O erzeugtes NO

2.1.1. Thermisches NO (Zeldovic Mechanismus)

Das thermische oder auch Zeldovic NO bildet den Hauptteil des freiwerdenden NO bei Verbrennungsvorgängen. Dieser Bildungspfad, auch als Heißluftreaktion bekannt, ist, wie dies der Name vorwegnimmt, entscheidend von der Temperatur abhängig.

Die Temperaturabhängigkeit begründet sich in der sehr hohen Aktivierungsenergie von 318kJ/mol für die erste Reaktion des Zeldovic Mechanismus nach Gleichung (2.2). Für das Stattfinden dieser Reaktion ist keine chemische Verbrennung notwendig.

Die reine Zufuhr von Energie wie z.B. in einem mit Luft gefülltem thermischen Reaktor reicht zur Erzeugung von NO aus. Entscheidend für die Bildung von thermischem Stickstoffmonoxid sind [MSSO04], [PH73], [PKS02], [WMD01], [HMO71]:

- Temperatur
- Sauerstoffkonzentration
- Verweilzeit bei einem Temperaturniveau

Der Anteil des thermisch gebildeten Stickstoffmonoxids macht 90-95% des motorisch erzeugten NO aus [MSSO04], [Sti99], [Gär01].

Die Temperaturabhängigkeit der thermischen Stickstoffmonoxidbildung ist in Abbildung 2.1 für ein stöchiometrisches Gemisch bei einem Druck von 60 bar dargestellt.

In Abbildung 2.1 ist mit Hilfe der später noch näher behandelten Simulation der thermischen Stickstoffmonoxidbildung die NO Bildung über der Zeit aufgetragen. Es zeigt sich, dass es zu einer nennenswerten Stickstoffmonoxidbildung im Gleichgewichtszustand erst ab einer Temperatur von 2000°K kommt und die Zeit bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes mit steigender Temperatur abnimmt.

Sowohl die Reaktionszeit bis zum Erreichen der Gleichgewichtskonzentration wie auch die Reaktionstemperatur stehen in einem exponentiellen Zusammenhang mit der Temperatur.

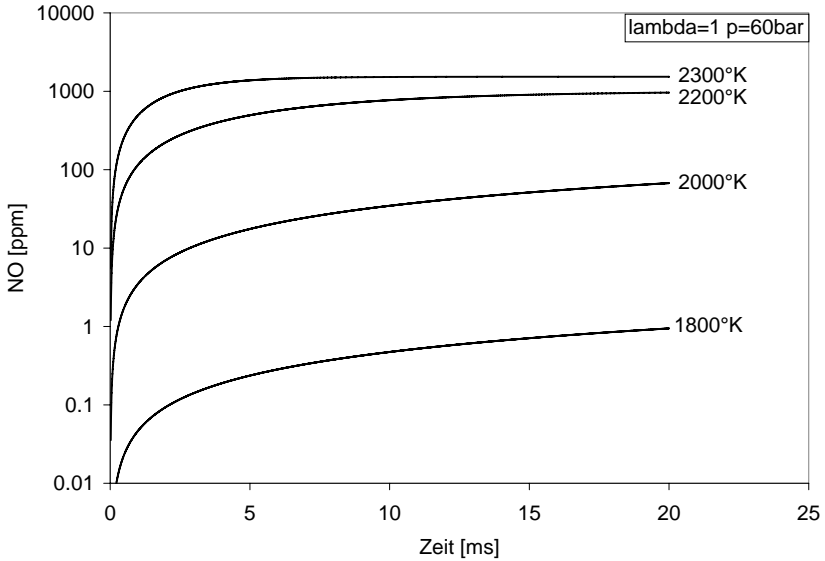


Abbildung 2.1.: Simulation der Stickstoffmonoxidbildung in einem thermischen Reaktor

Der heute anerkannte Zeldovic-Mechanismus zur Bildung von Stickstoffmonoxid bestand ursprünglich nur aus zwei Elementarreaktionen (2.2) und (2.3), die von J. Zeldovic 1946 veröffentlicht wurden[WMD01].



24 Jahre später wurde dieser Bildungsmechanismus von Lavoie und Heywood um eine Formel erweitert. Dieser zusätzliche Reaktionspfad (2.4) wird als „schnelle Hydroxylreaktion“ bezeichnet [LHK70], [Gär01].



Die Entstehung des thermischen Stickstoffmonoxids hängt, wie der Name nahelegt, im Wesentlichen von der Temperatur ab. Daher bildet sich

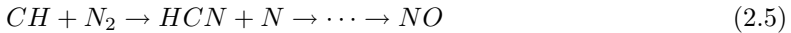
das motorisch erzeugte NO überwiegend im „Post-flame“ Bereich der Verbrennung. Dies ist bei einer Simulation von NO in geeigneter Form zu berücksichtigen [MSSO04].

Bei einem Verbrennungsmotor würde die Mittelung der Brennraumtemperatur zu falschen Ergebnissen führen, da, wie bereits gezeigt, der Zusammenhang zwischen NO-Konzentration und Temperatur stark nicht-linear ist.

2.1.2. Prompte NO-Bildung (Fenimore NO)

Die Bildung des Prompten NO nach C.P. Fenimore beschreibt die Stickstoffmonoxidbildung innerhalb der Flammenfront.

Hierbei bilden sich in sauerstoffarmen Flammen CH-Radikale. Diese reagieren gemäß(2.5) mit molekularem Luftstickstoff in einem Zwischenschritt zu Blausäure HCN, welche dann mit atomaren und molekularem Luftsauerstoff zu NO weiterreagiert. Diese Reaktion verläuft bei vornehmlich brennstoffreichen Bedingungen und wesentlich niedrigeren Temperaturen etwa 1000°K.



Diese Reaktion stellt den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt zur Bildung des Prompten NO dar.

Jener Mechanismus wird in der Literatur als weitaus komplizierter und unsicherer in der Vorhersage angesehen als die thermische NO-Bildung.

Die geringe Aktivierungsenergie von 92kJ/mol im Vergleich zu 318kJ/mol bei der Bildung des thermischen NO und die hohe Abhängigkeit der lokalen Brennstoffkonzentration, mag der Grund für die Vielzahl unterschiedlicher Geschwindigkeitskoeffizienten sein, die in der Literatur zu finden sind.

Dem Prompten NO wird nur ein sehr geringer Anteil von 5-10% des entstehenden NO zugeschrieben [WMD01],[MSSO04]. Anzumerken sei hier, dass eine genauere Untersuchung der Zusammenhänge und die Bereitstellung abgesicherter Geschwindigkeitskoeffizienten sehr wünschenswert wäre.

2.1.3. Brennstoff NO

Im Brennstoff gebundener Stickstoff wird bei der chemischen Reaktion frei und reagiert zum Teil als Promptes NO oder als thermisches NO gemäß den bereits erwähnten Reaktionsmechanismen.

Aufgrund des geringen Anteils an gebundenem Stickstoff in Kraftstoffen aus Erdöl spielt dieser Mechanismus nur eine untergeordnete Rolle [MSS04].

2.1.4. Stickstoffdioxidbildung NO_2

Das schädliche Stickstoffdioxid NO_2 bildet sich in der Regel erst bei niedrigeren Temperaturen $\leq 650^\circ C$ in Anwesenheit von Sauerstoff während der Transmissionsphase im Rauchabzug oder der Atmosphäre unter Einwirkung von Sauerstoff bzw. Ozon.

Einzig die Bildung innerhalb der Flammenfront mit nachfolgend schneller Abkühlung nach Fenimore ist als Bildungsherd für Stickstoffdioxid während des Verbrennungsprozesses benannt [Kol90].

2.2. Modellbildung von Stickoxidemissionen

2.2.1. Modellbildung

Modelle dienen uns als eine häufig abstrahierte Abbildung von Teilbereichen unserer alltäglichen Welt.

Modelle sollen Phänomene erklären (Atommodell, Wirtschaftsmodell, Verbrennungsmodell) oder Gesetzmäßigkeiten wiedergeben (Bewegungsgleichung, Geometrie). Hier wird deutlich, dass zur tatsächlichen Wiedergabe der vom Menschen gewünschten Informationen immer eine Form der Abstraktion nötig ist.

Ein fallender Ball wird nie exakt der Bewegungsgleichung folgen wie auch Wirtschaftsmodelle selbstverständlich nicht das Kaufverhalten eines Einzelnen darstellen können. Dennoch liegt die Aussagekraft so hoch, dass wir die aus Modellen gewonnene Informationen täglich nutzen.

Wesentliche Merkmale von Modellen stellen der Modelltyp, die Modellparameter, die Eingangsgrößen sowie der Rechenaufwand dar.

In den Ingenieurwissenschaften dienen Modelle zur Vorausberechnung, Optimierung und Überwachung von Konstrukten und Prozessen. Hierbei sind wie immer in dieser Disziplin Nutzen und Aufwand bei der Erstellung und Nutzung des Modells zu berücksichtigen.

Im Bereich der Verbrennungskraftmaschinen gibt es eine Vielzahl von Modellen, die einen Verbrennungsmotor abbilden können. Hierbei reicht der Bereich von sehr einfachen Modellen, in denen z.B. die Gaspedalstellung den Eingang und das Motormoment den Ausgang bildet [Com06], bis hin zu ausgesprochen komplexen dreidimensionalen Strömungssimulationen mit integrierter Reaktionskinetik [Rie99].

Allgemein werden diese Modelle in folgende Kategorien eingeteilt [MSSO04]:

- *Empirische Modelle*

Freie Gestaltung der Modellstruktur. Es ist kein Zusammenhang von physikalischen Gesetzen und Abbildungsstruktur notwendig

- *Nulldimensionale Modelle*

Nulldimensionale Einzonenmodelle, in denen die physikalische Beschreibung des Brennraumes sich auf skalare Parameter beschränkt, bei denen die räumliche Anordnung nicht berücksichtigt wird

- *Phänomenologische Modelle*

Nulldimensionale Mehrzonenmodelle in denen durch quasidimensionale Aufteilungen des Brennraumes in Zonen unterschiedliche Phänomene (Strahlausbreitung, Zündung, Reaktionskinetik) physikalisch oder empirisch simuliert werden können.

- *Eindimensionale Modelle*

Eindimensionale numerische Simulation des Ladungswechsels und phänomenologische Abbildung des Zylinders. Diese Modelle dienen zur stationären und transienten Vollmotorsimulation.

- *Dreidimensionale Modelle (CFD)*

Dreidimensionale numerische Berechnung der Strömung. In Verbindung mit Strahlmodellen und Reaktionskinetik umfassende, örtlich und zeitlich aufgelöste Simulation der motorischen Verbrennung.

Die dreidimensionalen numerischen Methoden der Strömungssimulation [Fer02] bieten in Kombination mit einer Verbrennungs- [AVL06] sowie einer Stickoxidsimulation die Möglichkeit, ort- und zeitaufgelöst in dem Brennraum einer VKM die Schadstoffbildung zu ermitteln [Rie99]. Diese hohe Simulationstiefe ist gerechtfertigt, soweit die hohe Detailinformation z.B. für die Brennraum- oder Einspritzdüsegestaltung von Interesse ist. Hierbei ist der Rechenaufwand jedoch erheblich. Daher werden in der Regel auch nur begrenzte Abschnitte der Verbrennungskraftmaschine in der Simulation berücksichtigt.

Ist man jedoch lediglich an den integralen Stickoxidemissionen einer Verbrennungskraftmaschine interessiert, haben sich im Bereich der Verbrennungskraftmaschinen zwei Formen der Simulation etabliert:

1. *Thermochemische Modelle*

Diese Modelle errechnen in der Regel mit Hilfe einer reaktionskinetischen Simulation die Stickoxidemissionen auf Basis eines erweiterten Zeldovic Mechanismus und gehören zur Kategorie der phänomenologischen Mehrzonenmodelle (s. Stickoxidbildung).

2. *Empirische Modelle*

Empirische Stickoxidmodelle bedienen sich in der Regel eines empirisch gefundenen mathematischen Zusammenhangs [Gär01] [Wen06] oder eines Künstlich Neuronales Netzes (KNN), welche in Abhängigkeit der Eingangsgrößen die Stickoxidemissionen beschreiben [TA99].

Sowohl thermochemische Modelle wie auch die empirischen Modelle lassen sich mit der eindimensionalen Simulation kombinieren.

2.2.2. Überblick Thermochemische Modelle

Die thermochemischen Modelle basieren hauptsächlich auf folgender Modellstruktur

- Thermodynamische Berechnung der Gasgrößen im Zylinder

- Gleichgewichtsrechnung zur Ermittlung der Stoffkonzentrationen im Arbeitsgas
- Reaktionskinetische Rechnung zur Berechnung der langsamen Stickoxidbildung

Die thermodynamische Berechnung der Gasgrößen im Zylinder findet in der Regel mit Hilfe eines nulldimensionalen Modells statt. Die Temperatur wird aus Druck und dem bekannten Zylindervolumen entsprechend der allgemeinen Gasgleichung errechnet. Diese Berechnungsmethode bildet heutzutage den Standard in der motorischen Prozessrechnung [PKS02] [MSSO04].

Dieser Modelltyp ist jedoch nicht in der Lage, Brennraumgeometrien oder Ortsabhängigkeiten der Verbrennung innerhalb des Brennraumes abzubilden. Alle Werte werden als Brennraummittelwert betrachtet.

Will man die errechneten thermodynamischen Größen jedoch für weiterführende Berechnungen nutzen, deren Abhängigkeiten nicht linear sind, so ist der entstehende Fehler speziell bei der Schadstoffberechnung zu groß.

Im Bereich der motorischen Verbrennung können die Unterschiede zwischen verbranntem und unverbranntem Gas bis zu 2000°C annehmen, wie in Abbildung 4.11 später noch gezeigt wird.

Der Einfluss der Temperatur auf die Stickoxidbildung ist in Abbildung 2.1 in Abschnitt 2.1.1 dargestellt. Es zeigt sich, dass es bei einer Einzonensimulation dieses Betriebspunktes rechnerisch zu keinerlei Stickoxidbildung kommen würde, weil die Temperatur der Einzonensimulation 1800°C kaum überschritten wird.

Um den großen Temperaturdifferenzen zwischen Frischladung und Rauchgas Rechnung zu tragen, wird der Brennraum in mindestens zwei Zonen unterteilt:

- in eine unverbrannte Zone, welche die Frischladung repräsentiert
- in eine verbrannte Zone, die das Rauchgas darstellt.

Getrennt sind beide Zonen durch die masselose Flammenfront.

Für die Rauchgastemperatur wird zu Beginn die adiabate Verbrennungstemperatur eingesetzt. Bei fortschreitender Reaktion nimmt die Rauchgastemperatur aufgrund des Wärmeübergangs immer weiter die Temperatur der unverbrannten Zone an. Abgebildet wird dieser Vorgang durch einen empirischen Ansatz.

Die Gleichgewichtsrechnung zur Ermittlung der Stoffkonzentrationen im Arbeitsgas ermittelt die chemische Zusammensetzung während der Kohlenwasserstoffverbrennung. Dies geschieht unter Verwendung temperaturabhängiger Gleichgewichtskonstanten für ausgewählte chemische Einzelreaktionen.

Die reaktionskinetische Simulation zur Berechnung der langsamen Stickoxidbildung ermittelt zeitabhängig die Konzentrationen für die wesentlichen langsameren Reaktionen der Stickoxidbildung. Diese können aufgrund der um ca. 2 Zehnerpotenzen langsamer ablaufenden Reaktionen nicht wie die übrigen Stoffe durch eine Gleichgewichtsrechnung ermittelt werden.

Eine solche Struktur wurde zum ersten Mal von [PG68] vorgestellt.

Die Berechnung der Brennraumtemperatur erfolgte mittels eines Zwei-Zonen-Modells. In dieser Veröffentlichung wurde anstelle des später üblichen Zeldovic-Mechanismuses eine globale Oxidation des molekularen Sauerstoffs und Stickstoffs vorgesehen ($O_2 + N_2 \rightarrow 2NO$), darüber hinaus wurden Dissoziationsvorgänge vernachlässigt.

Trotzdem es sich hierbei um eine sehr frühe Arbeit handelt, wurde bereits berücksichtigt, dass die Stickoxidkonzentration während der motorischen Verbrennung aufgrund der sich sehr schnell ändernden Bedingungen nicht als Gleichgewicht behandelt werden kann. Die Stickoxidbildung wurde mittels einer reaktionskinetischen Rechnung dargestellt. Konzipiert wurde dieses Modell ursprünglich für die ottomotorische Verbrennung.

Spätere weiterführende Arbeiten, wie [LHK70] nutzten statt der globalen Oxidation den erweiterten Zeldovic Mechanismus und berechneten die Gleichgewichtskonzentrationen für die Dissoziationsvorgänge der Kohlenwasserstoffoxidation. Für die Wiedergabe der korrekten Temperatur

wurde ebenfalls zwischen verbranntem und unverbranntem Gas unterschieden.

In [PH73] wird ein ausführlicher Überblick über die bis dahin bestehenden Werte für die Geschwindigkeitskonstanten der Stickoxidbildung gegeben. Darüber hinaus bestimmten die Autoren aus diesen Werten geeignete Mittelwerte, die für die weiteren Berechnungen in jener Arbeit herangezogen wurden.

Die Geschwindigkeitskonstanten nach [PH73] bilden seither für viele Arbeiten die Grundlage für die Berechnung von motorischen Stickoxiden. In [Gär01] wie auch in [Hei96] wurden diese Konstanten mit Erfolg auch für die Berechnung von dieselmotorischem Abgas eingesetzt, wogegen sie in [Web01] bei der Berechnung von ottomotorischem Abgas zu einem zu hohen Wert führten.

Das verwandte Temperaturmodell stellt ein Mehrzonenmodell dar, welches aus fünf Zonen gleicher Ladungsmasse besteht, die nacheinander von der Flammenfront durchlaufen werden.

Das wohl populärste Temperaturmodell für ein Zwei-Zonen-Modell entstammt [Hei96].

Dieses Temperaturmodell berechnet aus dem Differenzdruck zwischen gefeuertem und simuliertem Kompressionsdruckverlauf, der verbrannten Masse und einer empirisch gefundenen Anfangstemperatur den Temperaturverlauf in der verbrannten Zone.

Der sogenannte „A-Wert“ soll sich aus dem Vergleich mit Messungen ergeben und für den Verbrennungsmotor repräsentativ sein, soweit Brennraumgeometrie und Gemischbildung nicht verändert werden. In [Gär01] wurden mehrere Vergleiche aufgeführt, die sich mit der Ermittlung und dem Vergleich verschiedener A-Werte beschäftigen.

Für die betrachteten Arbeiten, die die dieselmotorische Verbrennung zum Gegenstand hatten, lagen die Starttemperaturen der verbrannten Zone zwischen 1380°K und 1740°K!. Zu bemerken sei hier, dass die meisten Autoren mit dieser Annahme für den gesamten Kennfeldbereich des Motors arbeiten.

Zieht man in Betracht, dass die Temperaturabhängigkeit der Stickoxidbildung sehr hoch ist (vgl. 4) und es sich jeweils um Dieselmotoren handelt,

erscheint die Temperaturdifferenz sehr hoch. Da diese jedoch auf eine Kette aus unterschiedlicher Messtechnik und unterschiedlicher Annahmen in der Simulation kalibriert wird, ist nachzuvollziehen, wie es zu diesen Unterschieden kommen kann.

In [Web01] wurde das gleiche Verfahren auf die ottomotorische Verbrennung angewandt und zwischen geschichteter und homogener Verbrennung unterschieden. Die A-Werte lagen hier je nach Einlassdrall und Brennverfahren zwischen 1820°K (hohe Ladungsbewegung und Schichtbetrieb) und 1950°K (geringe Ladungsbewegung und Homogenbetrieb).

In [Gär01] wird dieses Verfahren abgeändert und statt des A-Wertes die adiabate Flammentemperatur herangezogen. Dieser Ansatz scheint plausibel, da zu Beginn der Verbrennung die verbrannte Zone weitestgehend der Flammenfront entspricht. Darüber hinaus können auf diese Weise Effekte wie Gaszusammensetzung und Druck zum Zeitpunkt der Entflammung berücksichtigt werden.

Aus den genannten Gründen wird für die thermochemische Analyse in dieser Arbeit ebenfalls der Ansatz verwandt, die adiabate Flammentemperatur als Startwert für das Temperaturprofil der verbrannten Zone heranzuziehen.

2.2.3. Überblick Empirische Modelle

Im vorangegangenen Kapitel wurden Verfahren gezeigt, die mit Hilfe von Annahmen und Thermochemie die Stickoxidemissionen direkt berechnen. Diese Verfahren bedürfen jedoch eines hohen Aufwandes. Als echtzeitfähige Teilfunktion sind sie daher nur bedingt geeignet.

Will man z.B. die Stickoxidemissionen an einem Motorenprüfstand zu Diagnosezwecken der Abgasmessanlage simulieren oder innerhalb einer Gesamtfahrzeugsimulation die Rohemissionen vorhersagen, so bietet sich eher an, dies mittels eines empirischen Modellansatzes zu bestimmen. Hierbei sollte jedoch immer eine Unabhängigkeit des Modells vom spezifischen Versuchsträger gegeben sein. Diese Allgemeingültigkeit fordert daher unabhängige Eingangsparameter.

Zur Darstellung eines solchen Modells kommen unterschiedliche Typen zum Einsatz:

- Potenzansatz
- Polynomialansatz
- Künstlich Neuronale Netze (KNN)

Der **Potenzansatz** in allgemeiner Form lautet:

$$f(x_1 \dots x_n) = \prod_{k=1}^n x_k^{a_k} \quad (2.6)$$

x : Modelleingang
 F : Modellausgang
 a : Modellparameter Exponenten

Der **Polynomialansatz** lautet in seiner allgemeinen Form

$$P(X_1, \dots, X_n) = \sum a_{i_1, \dots, i_n} X_1^{i_1}, \dots, X_n^{i_n} \quad (2.7)$$

P : Modellausgang
 X : Modelleingänge
 a : Modellparameter Polynomkoeffizienten

Der **Polynomialansatz** wird zur Modellbildung in kommerziellen Programmen zur statistischen Versuchsplanung genutzt [AVL]. Hiermit lassen sich sehr effizient mehrdimensionale Zusammenhänge abbilden und Rückschlüsse auf die physikalischen Gesetzmäßigkeiten und Wechselwirkungen der Einflussfaktoren (unabhängige Eingangsvariablen) untereinander ziehen.

Die Polynomkoeffizienten, welche die Modellparameter bilden, werden nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt. Die Ausgangsgröße wird innerhalb der statistischen Versuchsplanung Zielgröße genannt [AVL].

Die Funktionsweise der **Neuronalen Netze** soll, angelehnt an das biologische Gehirn dessen wesentliche Funktions-Charakteristik in abstrahierter Weise wiedergeben. Hierbei werden die einzelnen Nervenzellen gedanklich wie in Abbildung 2.2 abgebildet.

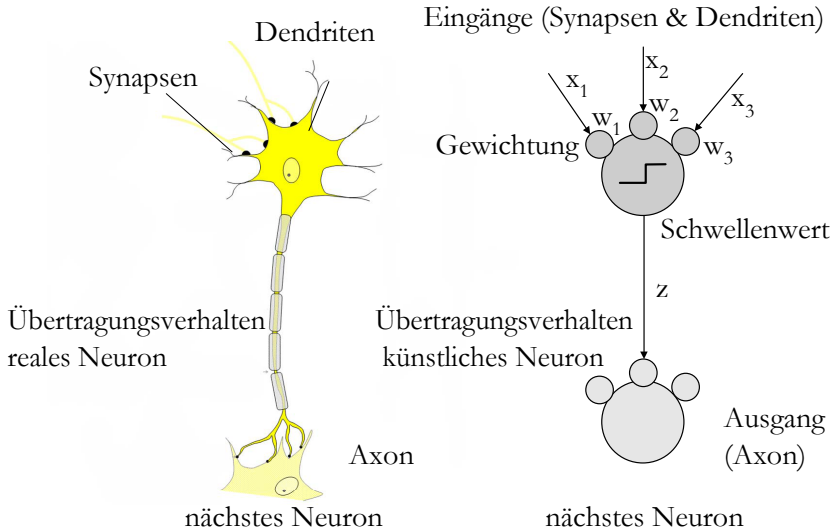


Abbildung 2.2.: Vergleich zwischen realem und künstlichem Neuron

Die reale Nervenzelle empfängt die Signale bzw Impulse der vorgelagerten Nervenzellen über die Synapsen, welche die Signalübergabestellen zwischen Nervenzellen darstellen.

Diese Impulse werden dann über die Dendriten in die Nervenzelle weitergeleitet. Wird dort der notwendige Schwellenwert überschritten, kommt es zu einer Signalveränderung und -weiterleitung an das Axon und damit an nachgelagerte Nervenzellen [Bra91].

Die Signalveränderung besteht dabei aus einer Summenbildung gleichzeitig eintreffender Impulse anderer Nervenzellen und einem Übertragungsverhalten der Nervenzelle selbst.

Die Umsetzung bzw. Abstraktion in die Neuroinformatik beschränkt sich hierbei auf die Anordnung der Nervenzellen, die Summenbildung, den Schwellenwert und einen Teil der Übertragungsfunktion, welche durch die Wichtung des Signals wiedergegeben wird.

Die Funktionsweise der „Künstlich Neuronale Netze“ (KNN) stellt sich wie folgt dar.

Die Signale werden bei der Übergabe mit einem Gewichtungsfaktor multipliziert. Beim Eintreffen am Neuron werden alle parallel ankommenden Signale addiert. Wird der für das Neuron notwendige Schwellenwert überschritten, kommt es zu einer Signalweitergabe am Ausgang.

Die Gewichtung sowie der Schwellenwert stellen die Modellparameter dar, mit denen das neuronale Netz auf den Ausgang bzw. den Zielwert angepasst werden kann. Zusätzlich zu den Gewichtungen und dem Schwellenwert kann dem Neuron noch eine Übertragungsfunktion gegeben werden. Diese nennt sich Aktivierungsfunktion und kann ein lineares oder auch sigmoides Verhalten besitzen.

Die Strukturierung der Neuronen wird schichtweise vorgenommen. Die erste Schicht wird Eingabeschicht genannt, da diese den Variableneingang bildet, und analog die letzte Schicht Ausgabeschicht. Die nicht sichtbaren Schichten dazwischen werden versteckte Schichten genannt.

Mathematisch beschreiben lassen sich neuronale Netze folgendermaßen.

$$z(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \sum_j w_j x_j - T = \mathbf{w}^T \mathbf{x} - T \quad (2.8)$$

mit

z	:Modellausgang
x	:Modelleingang
w	:Modellparameter Wichtungsfaktor
T	:Modellparameter Schwellenwert

Hierbei wird der Eingangsvektor \mathbf{x} als inneres Produkt mit dem Wichtungsvektor \mathbf{w} multipliziert und das entstehende Signal um den Schwellenwert T gemindert. Zur Bestimmung der Modellparameter „Künstlicher Neuronaler Netze“ sei auf weiterführende Literatur verwiesen.

Für Modelle, bei denen der physikalische Zusammenhang nicht interessiert, werden innerhalb der statistischen Versuchsplanung häufig auch künstliche Neuronale Netze als Modell herangezogen.[Quelle für den KNN kram]

Die erste Arbeit, welche die Verwendung eines empirischen Modells zum Inhalt hatte, war das FVV Forschungsvorhaben [Sch75]. Hier wurde die Stickoxidemission eines Dieselmotors mit Hilfe eines Potenzansatzes abgebildet. Als Eingangsgrößen ist für dieses Modell neben motorischen Größen wie Luftmasse, Luftverhältnis und Drehzahl der indizierte Zylinderdruck zusammen mit der daraus ermittelten Gastemperatur ausgewählt worden.

Arbeiten aus jüngerer Zeit sind [Gär01] und [Wen06], die beide ebenfalls für einen Dieselmotor die Stickoxidemission mit Hilfe eines empirischen Modells abgebildet haben.

In [Gär01] wurden die Stickoxidemissionen mittels eines polynomialen Modells abgebildet.

3. Messtechnik & Auswertung

3.1. Zylinderdruckindizierung

Der Druckverlauf und die daraus errechenbaren Resultate stellen für das NO_x -Modell eine sehr wichtige Eingangsgröße dar. Erst die Information des Zylinderdruckverlaufes macht es möglich, ein echtzeitfähiges NO_x -Modell zu erstellen. Daher soll im Folgenden kurz auf die Komponenten der Zylinderdruckindizierung eingegangen werden.

3.1.1. Messtechnik

Die Messkette der Zylinderhochdruckindizierung lässt sich in folgende Teile unterteilen [WG02]:

- piezoelektrische Druckaufnehmer
- Messverkabelung
- Ladungsverstärker
- Winkelaufnehmer
- Indiziergerät (Datenerfassung & Auswertung)

Piezoelektrische Druckaufnehmer

Der piezoelektrische Druckaufnehmer gibt bei mechanischer Beanspruchung ein dazu proportionales elektrisches Ladungssignal ab. Dies geschieht durch die Verwendung von Piezokristallen als Sensorelement, deren elektrische Polarisierung sich unter Krafteinfluss ändert.

Zur Vergrößerung der messbaren Ladung werden die Sensorelemente wassergekühlter Druckaufnehmer im Sensorgehäuse mechanisch in Reihe geschaltet. Das elektrische Signal hingegen wird als Parallelschaltung erfasst [Hoh07b], [WG02].

Als Druckaufnehmer zur Messung des Zylinderdruckes wurde ein Kistler 6061B ausgewählt, mit diesem Sensortyp wurden am Fachgebiet bei der Indizierung von PKW–Ottomotoren bereits gute Erfahrungen gemacht. Hierbei handelt es sich um einen wassergekühlten Sensor mit einem relativen Messbereich bis 250 bar und einer Empfindlichkeit von 25pC/bar.

Die Zylinderdrucksensoren sind mittels einer Adapterhülse, die Öl- und Kühlraum durchquert, brennraumbündig eingebaut.

Messverkabelung

Die Kabel, welche das Ladungssignal zum Ladungsverstärker weiterleiten, verfügen über einen Isolationswiderstand von $> 10^{13}\Omega$. Somit wird verhindert, dass die Ladung als Nebenschluss abfließt.

Der Ladungsverstärker wurde motornah in der Prüfstandszelle aufgestellt, wodurch das Ladungssignal der Druckaufnehmer über ein sehr kurzes Kabel an den Ladungsverstärker geführt werden konnte. Somit können elektromagnetische Einstreuungen weitgehend vermieden werden.

Ladungsverstärker

Der Ladungsverstärker hat die Aufgabe, das vom Drucksensor kommende, sehr schwache Ladungssignal in eine dem Ladungssignal proportionale Spannung zu verwandeln. Dieses wird dann dem Datenerfassungsgerät zur weiteren Verarbeitung zugeführt werden.

Für die Durchführung der Versuche wurde ein Ladungsverstärker vom Typ AVL MicroIFEM benutzt. Hierbei wurden die kontinuierliche Driftkompensation sowie der 100kHz Tiefpassfilter als Betriebsparameter voreingestellt.

Indiziergerät (Datenerfassung & Auswertung)

Als Datenerfassungs- und Auswertegerät wurde das System AVL Indimaster 670 benutzt. Dieses verfügt über 16 14bit A/D Wandler Kanäle, die getriggert gleichzeitig die am Eingang anliegende Spannung des Messsignals wandeln können (sample hold).

Winkelaufnehmer

Zur Erfassung der Winkelposition der Kurbelwelle wurde ein optischer Drehwinkelsensor vom Typ AVL 364C an der Riemenscheibe angebracht. Dieser wird mit einer Auflösung von 720 Marken pro Umdrehung verwendet.

Der Winkelaufnehmer dient der Zuordnung des gemessenen Zylinderdrucks zur Kurbelwellen- bzw. Kolbenposition. Hierfür bieten diese Sensoren zwei Winkelinformationen auf getrennten Kanälen.

Der erste Kanal (TRIG) enthält eine Marke pro Umdrehung, die in der Datenerfassungseinheit zur eindeutigen Positionsbestimmung bei Messbeginn sowie zur Diagnose der Winkelteilungsinformation genutzt wird.

Der zweite Kanal (CDM) enthält die Winkelinformation, d.h. pro °KW werden entsprechend der gewählten Auflösung eine bestimmte Anzahl von Signalen ausgegeben.

Näheres zur allgemeinen Indiziertechnik findet sich in [WG02].

3.1.2. Nulllinienfindung

Piezoelektrische Druckaufnehmer sind prinzipbedingt nicht in der Lage, den Absolutdruck im Brennraum zu messen. Die am Indiziergerät gemessene Spannung gibt lediglich den wechselnden Druck p_{mess} im Zylinder wieder.

Das Festlegen eines Absolutdruckniveaus bezeichnet man als Nulllinienfindung. Die konstante Verschiebung Δp_n der Druckkurve p_{mess} wird für

jedes Arbeitsspiel neu errechnet. Damit erhält man die Absolutdruckkurve p_{zyl} .

$$p_{zyl}(\varphi) = p_{mess}(\varphi) + \Delta p_n \quad (3.1)$$

Die Nulllinienfindung wird heute üblicherweise mit Hilfe der thermodynamischen Nulllinienfindung oder mit Hilfe eines Referenzdrucksensors durchgeführt.

Für die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit wurde die Nutzung eines Referenzdrucksensors gewählt, da dies zu einem genaueren Ergebnis führt. Schwingungen im Drucksignal, z.B. durch den Körperschall eines schließenden Ventils, insbesondere bei hohen Drehzahlen, können sonst bei der thermodynamischen Nulllinienfindung [Hoh80] zu Störungen im Absolutdruckniveau des Zylinderdruckverlaufs und damit zu fehlerhaften Ergebnissen führen.

Die Auswirkungen einer ungenauen Nulllinienfindung auf die Ergebnisse sind je nach gewünschtem Resultat unterschiedlich.

Der **indizierte Mitteldruck**, der als Bezugsgröße für den inneren Lastzustand (ohne mechanische Reibung) des Motors herangezogen wird, ist unabhängig vom Bezugsniveau des Zylinderdruckverlaufs.

Die mathematische Definition ergibt, dass innerhalb des pV-Diagramms (vgl. [Hoh07b]) die eingeschlossene Fläche des Druckverlaufs geteilt durch das Hubvolumen den Mitteldruck ergibt. Damit ist diese Fläche beliebig entlang der Ordinate verschiebbar, ohne dass sich ihr Wert ändert.

Der **Heizverlauf** nach [Hoh82] ist nur in sehr geringem Maße von einer ungenauen Nulllinienfindung betroffen.

Die Formel (3.3) ist nicht von der Nulllinienfindung abhängig, da nur eine Druckdifferenz ausgewertet wird. Lediglich die temperaturabhängige Wärmekapazität wird beeinflusst, da die Temperaturermittlung den Absolutdruck im Zylinder heranzieht. Dieser Einfluss ist gering. So ändert sich das Integral des Heizverlaufes bei einer Verschiebung der Druckkurve um 0,1bar lediglich um ein halbes Prozent.

Der Einfluss eines falschen Absolutdruckes bei Wandwärmemodellen ist größer da der Absolutdruck direkt in die Berechnung eingeht.

3.1.3. Verbrennungsverlauf

Der Verbrennungsverlauf oder Brennverlauf, wie er in [PKS02] dargestellt ist, stellt die theoretische Grundlage für die im Brennraum einer Verbrennungskraftmaschine umgesetzte Brennstoffenergie dar.

Der Umsetzung der Brennstoffenergie kommt im Verlauf der Arbeit eine entscheidende Rolle zu, da sowohl der rechnerische Flächenschwerpunkt der differentiellen Wärmefreisetzung wie auch der Verlauf an sich Eingangsgrößen der Stickoxidmodelle bilden.

Die Berechnung des Brennverlaufes kann unter Inkaufnahme einer verringerten Genauigkeit stark vereinfacht werden. Dies ist auch zulässig, sofern die Beurteilung des Brennverlaufes nur qualitativ vergleichend, z.B. innerhalb einer Parametervariation, erfolgen soll.

Den Grenzfall eines vereinfachten Verbrennungsverlaufes bildet der Heizverlauf der alle Vernachlässigungen enthält.

Gegenstand von Vereinfachungen können folgende Punkte sein:

- Vernachlässigung der Ein- und Austrittsenthalpien
- Vernachlässigung der Leckage
- Vernachlässigung der Wandwärme
- vereinfachte Gaskalorik
- konstante Gaskalorik

Hierbei ist die Sortierung hierarchisch, d.h., die Ein- und Austrittsenthalpien werden am seltensten mit abgebildet und am ehesten vernachlässigt. Um dem realen Verbrennungsablauf gerecht werden zu können, werden sogenannte Mehrzonenmodelle benutzt, die unterschiedliche Gaszusammensetzungen und Temperaturbedingungen im Brennraum besser abbilden können.

Die Auswertung der Messdaten der Zylinderdruckindizierung spielen in der vorliegenden Arbeit eine wichtige Rolle.

Wie später in Kapitel 4 noch gezeigt wird, hat die Lage der Verbrennung und damit der Verbrennungsschwerpunkt einen wesentlichen Einfluss auf die Stickoxidbildung. Damit stellt dieser einen entscheidenden Parameter für das datenbasierte Echtzeitmodell dar. Der Auswertung dieser Größe kommt daher auch eine zentrale Rolle zu, weil unterschiedliche Auswertalgorithmen zu abweichenden Ergebnissen führen. Zur Auswertung wurde das kommerzielle Programm AVL IndiCom 1.6 herangezogen. Dieses verfügt über zwei verschiedene Auswertalgorithmen.

Die beiden Algorithmen sind wie folgt definiert:

Thermodynamik 1:

$$Q_i = \frac{1}{\kappa - 1} [\kappa p_i (V_{i+1} - V_{i-1}) + V_i (p_{i+1} - p_{i-1})] \quad (3.2)$$

Thermodynamik 2:

$$Q_i = \frac{1}{\kappa - 1} V_{i+1} \left[p_{i+1} - p_{i-1} \left(\frac{V_{i+1}}{V_{i-1}} \right)^{\kappa_i} \right] \quad (3.3)$$

$$\kappa_i = \frac{0,2888}{c_{v_i}} + 1 \quad (3.4)$$

$$c_{v_i}(T) = 0,7 + T_i(0,255)10^{-3} \quad (3.5)$$

V_i	:Zylindervolumen	$[m^3]$
p_i	:Zylinderdruck	$[Pa]$
κ_i	:Polytropenexponent	$[-]$
c_{v_i}	:spezifische Wärmekapazität bei V=const.	$[J/kg^\circ K]$
T_i	: Zylindertemperatur	$[^\circ K]$

Die beiden aufgeführten Algorithmen errechnen lediglich die Wärmefreisetzung, die aus dem Druckverlauf resultiert. Das bedeutet, die Verluste aus Leckage sowie der Wandwärme bleiben bei der Berechnung unberücksichtigt. Die durch die Verbrennung des Kraftstoffes freigesetzte Energie ist daher größer als die errechnete.

Der Algorithmus Thermodynamik 1 (3.2) errechnet die Wärmefreisetzung bei konstanten Polytropenexponenten. Diese Vereinfachung ergibt einen Fehler im Verlauf der Energiefreisetzung sowie einen möglichen Fehler in der Quantifizierung der Energiefreisetzung, weil der Polytropenexponent von der Temperatur und dem Druck abhängt und somit über der Zustandsänderung einer realen Verbrennungskraftmaschine variiert.

Der Algorithmus Thermodynamik 2 (3.3) berücksichtigt die sich in einer Verbrennungskraftmaschine während des Prozesses ändernde Gaskalorik über Gleichung (3.5). Hierbei handelt es sich um einen Ansatz, der ursprünglich in [Hoh82] eingeführt wurde.

Durch die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität kann der Verlauf Energiefreisetzung sowohl qualitativ wie auch quantitativ genauer wiedergegeben werden. Im Ansatz Thermodynamik 1 ist das quantitative Ergebnis davon abhängig, wie gut der vorgewählte Polytropenexponent zum betrachteten Zyklus passt.

Zur Ermittlung der Gastemperatur ist es notwendig, die im Zylinder eingeschlossene Masse zu kennen. Diese kann entweder automatisch aus dem Druckverlauf berechnet oder über direkte Vorgaben angegeben werden.

Die automatisierte Berechnung ermittelt aus Zylinderdruck, Zylindervolumen und einer angenommenen Saugrohrtemperatur von 25°C die Startmasse. Die direkte Vorgabe ist jedoch sinnvoller, da Schwingungen des gemessenen Druckverlaufes im Bereich des Ladungswechsel zu groß sind und die Ladungstemperatur bedingt durch Restgas und Abgasrückführung stärkeren Abweichungen unterliegt.

Bei Vergleichen wie in Abbildung 3.1 ergaben sich bei der Ermittlung der Masse zwischen gemessener und gerechneter Zylinderladung Unterschiede von bis zu 60% in der absoluten freigesetzten Wärmemenge!

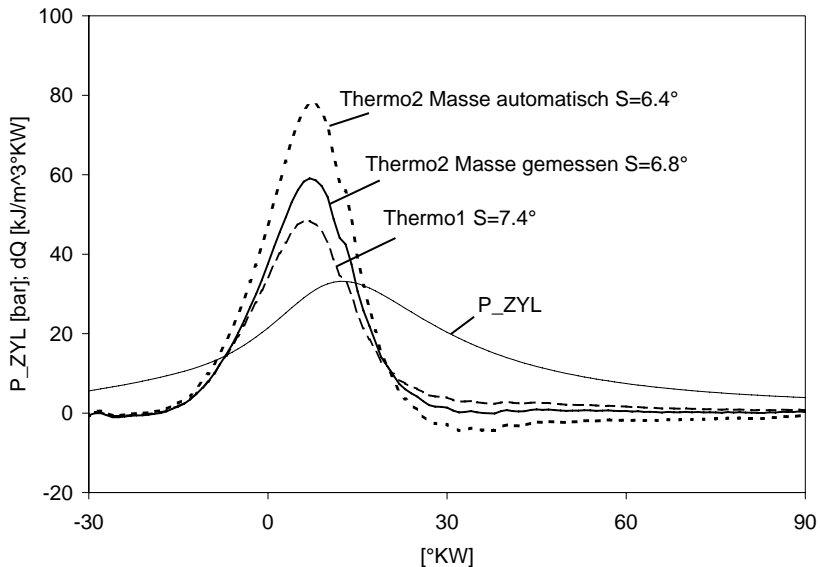


Abbildung 3.1.: Vergleich der unterschiedlichen Auswertelgorithmen für den Heizverlauf

Die Unterschiede bei dem in dieser Arbeit wichtigeren Verbrennungsschwerpunkt sind weitaus geringer. Ein Unterschied des Verbrennungsschwerpunktes von ca. einem Grad kann dennoch innerhalb einer Modellabbildung die Stickoxidkonzentration ca 100 ppm verändern (vgl. Bild 5.3).

3.1.4. Eigenschaften des Arbeitsgases

Zur Untersuchung des Zylinderdruckverlaufes ist es hilfreich, die Kalorik des Arbeitsgases in Abhängigkeit des Gaszustandes zu kennen. Arbeiten hierzu existieren unter anderem von DeJaegher [DeJ76] und Zacharias [Zac66]. Eine umfassende Beurteilung der Arbeiten findet sich in [Gri06] und [BCB03].

Bearbeiter	Output	Modell-Typ	H/C-Typ	Luft-/Kraftstoff	Dissoziation
Justi 1938	u	Polynom-ansatz	Otto	beliebig	nein
Zacharias 1970	h, s, R, Z	Polynom-ansatz	$h/c = 2,35$	$\lambda \geq 1$	ja
DeJaegher 1984		Datenbank	$h/c = 2,0$	beliebig	ja
Berner 2003		Datenbank	beliebig	beliebig	ja

Tabelle 3.1.: Verschiedene Modelle zur Ermittlung der Gaskalorik

Die Notwendigkeit ergibt sich aus den nicht konstanten thermodynamischen Größen wie Wärmekapazität und Gaskonstanten. D.h, die Stoffeigenschaften sind von Druck und Temperatur abhängig. Hinzu kommt, dass sich die Zusammensetzung des Arbeitsgases, bedingt durch Verbrennung und Dissoziation, stetig ändert und damit unterschiedliche Stoffe in unterschiedlichen Konzentrationen vorliegen, welche unterschiedliche thermodynamische Eigenschaften haben.

Zu Beginn der Forschung im letzten Jahrhundert wurde versucht, dem Anwender meist einen fertigen Formelzusammenhang zur Verfügung zu stellen. Dieser beschreibt das Arbeitsgas als Ganzes in Abhängigkeit weniger Parameter (z.B.:Temperatur und Luft-/Kraftstoffverhältnis) [Jus38].

Auf diese Weise blieb es dem Nutzer erspart, in eine Realkreisprozessrechnung einen Komponentenansatz zu implementieren, welcher unter Berücksichtigung der zu jener Zeit zur Verfügung stehenden Rechenleistung sehr aufwendig war.

Nachteil dieser Modelle ist, dass diese häufig nur mit sehr eingeschränkten Randbedingungen genutzt werden können. So ist z.B. die Kraftstoffart nicht frei wählbar oder das Luftverhältnis beschränkt sich auf den stöchiometrischen und oder mageren Fall.

In Tabelle 3.1 ist ein Überblick über die wichtigsten bekannten Ansätze zur Bestimmung der Gaskalorik gegeben.

Neuere Ansätze verfolgen einen Weg, der eine Gleichgewichtsrechnung innerhalb der thermodynamischen Auswertung vorsieht, um die Stoffkonzen-

trationen des betrachteten Reaktionssystems zu erfassen.

Auf diesem Weg können anhand von Tabellenwerken wie [Bur01] die thermodynamischen Größen der Einzelkomponenten in Abhängigkeit der Temperatur innerhalb eines Zwei-Zonen-Modells ermittelt werden. Diese Vorgehensweise führt zu dem in der Literatur verwandten Namen Komponentenansatz.

Summiert man die thermodynamischen Größen der einzelnen Komponenten anhand der Regeln, wie sie z.B. in [PKS02] dargestellt sind, erhält man die Kalorik des Arbeitsgases im Ganzen.

Es sei hier darauf hingewiesen, dass dies einen iterativen Prozess notwendig macht, weil zu Beginn der Prozessrechnung für kalorische Größen vereinfachte Annahmen getroffen werden müssen. Diese führen nach Ermittlung der genaueren thermodynamischen Größen zu einer exakteren Berechnung von Temperatur und Wärmeenergie.

Diese relativ aufwendige Vorgehensweise ist jedoch innerhalb des normalen Messbetriebs nicht möglich und auch nicht nötig. Häufig wird zur Beurteilung der bereits erwähnte Heizverlauf nach [Hoh82] herangezogen. Dieser verfügt mit Gleichung (3.5) bereits über einen Ansatz, mit dem die Kalorik des Verbrennungsgases berücksichtigt wird.

Nachstehend sollen für folgende 3 Fälle Energieumsatz und Verbrennungsschwerpunkt bei unterschiedlichen Lasten und Luftkraftstoffgemischen betrachtet werden.

1. Energieumsatz mit Thermodynamik 1
2. Energieumsatz mit Thermodynamik 2 und vorgegebener Masse
3. Energieumsatz mit Gaskalorik nach 2-Zonen Komponentenansatz

Auf den Diagrammen 3.2 ist zu erkennen, dass die Unterschiede in der spezifischen Wärmekapazität und den Polytropenexponenten zwischen dem Zwei-Zonen-Komponentenansatz und der Gaskalorik nach dem schnellen Heizgesetz Thermodynamik2 eine minimale Auswirkung auf die errechnete Energiefreisetzung haben. Hingegen ist der Fehler, der aus dem Heizgesetz Thermodynamik1 resultiert, drastisch. Daher sollte dieser unter Berücksichtigung der gestiegenen Rechenleistung von Computern nicht mehr genutzt werden.

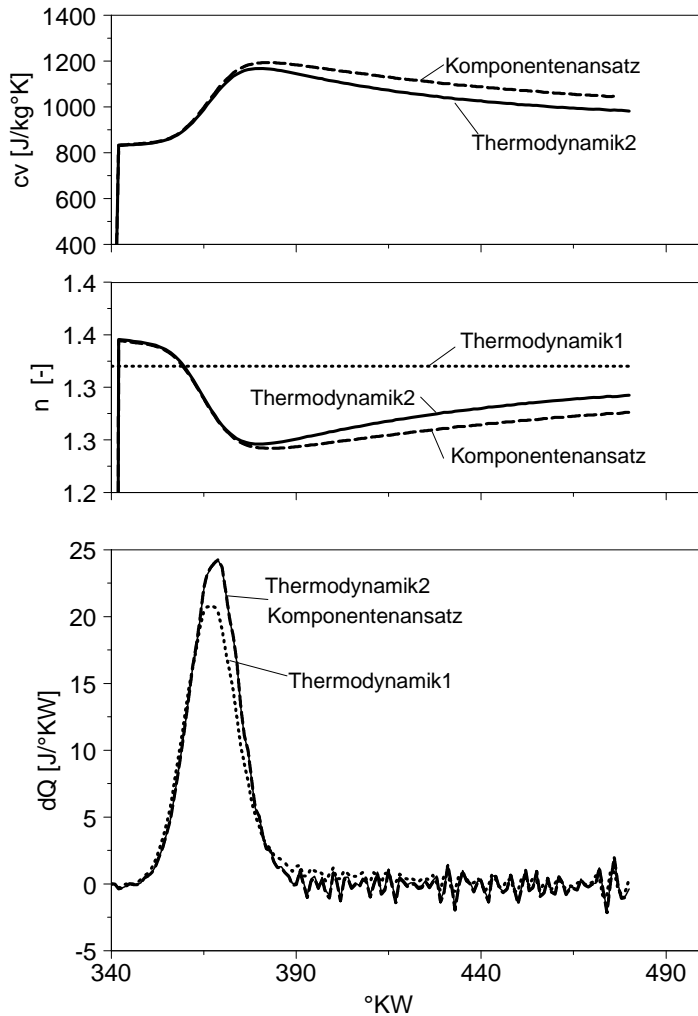


Abbildung 3.2.: Vergleich der Heizverläufe bei Berechnung mit Thermodynamik1, Thermodynamik2, Zwei-Zonen-Komponentenansatz

Die Gleichgewichtsrechnung die in dieser Arbeit Verwendung findet, wird zur Ermittlung der Stickoxidkonzentrationen benötigt. Die Stoffkonzentrationen der Gleichgewichtsrechnung ergeben die Startbedingungen für die Differentialgleichungen der Reaktionskinetik in der verbrannten Zone. Folgende Stoffgrößen müssen für die Berechnung ermittelt werden:

- Enthalpie
- spezifische Wärmekapazität
- Entropie
- Gibbs– Enthalpie

Ausgehend von dieser Arbeit kann festgehalten werden, dass die "Kalorik nach Zacharias" für einen Ottomotor nur bedingt geeignet ist, weil diese nur für $\lambda \geq 1$ definiert ist und im interessanten Bereich des stöchiometrischen Betriebs eine zu grobe Rasterung aufweist.

Die während des Prozesses auftretenden Temperaturen in der Rauchgaszone führen zu Dissoziationsvorgängen, die die Gaszusammensetzung und damit auch die Gaskalorik in Abhängigkeit von Temperatur und Druck ändern.

Wandwärmeverluste

Neben der Gaskalorik spielen bei der Berechnung des Verbrennungsverlaufs auch die Wandwärmeverluste eine entscheidende Rolle. Die im Brennraum entstehende Wärme wird beim Ottomotor hauptsächlich als erzwungene turbulente konvektive Wärme an die Wandung abgeführt [Bar92].

Diese Wärme fehlt bei der Ermittlung der umgesetzten Energie aus dem Indikatordiagramm unter der Verwendung des Auswertealgorithmus Thermodynamik 2. Wie aus 3.3 hervorgeht, verändert die Berücksichtigung der Wandwärme den Verbrennungsverlauf nicht nur quantitativ, sondern auch qualitativ. Für den Verbrennungsschwerpunkt ergibt sich eine Verschiebung von 1,5°KW Richtung spät.

Der Verbrennungsverlauf dient in der vorliegenden Arbeit zur Ermittlung des Verbrennungsschwerpunktes. Dieser wird als Eingangsparameter genutzt und hat, wie später noch gezeigt wird, einen erheblichen Einfluss auf den Modellausgang. Eine Verschiebung des Verbrennungsschwerpunktes um nur wenige Grad kann bereits eine Veränderung von mehreren 100ppm in der Stickoxidkonzentration zur Folge haben.

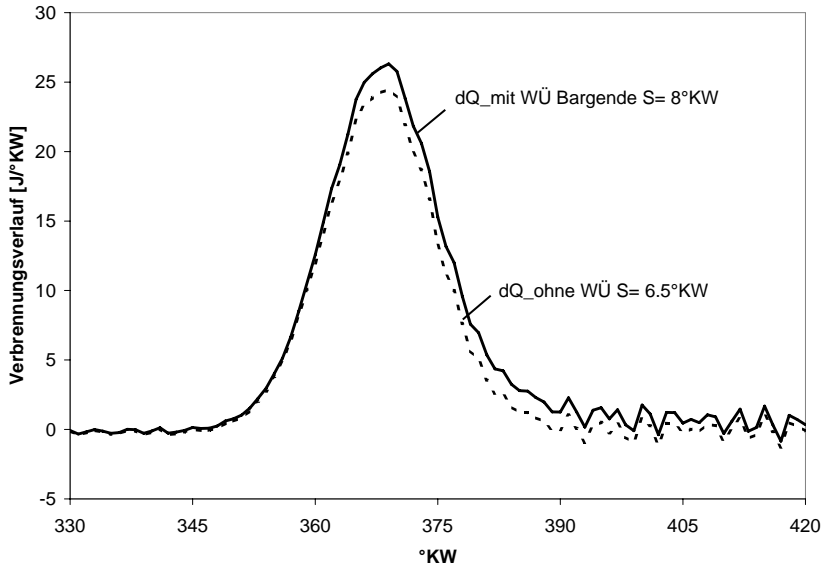


Abbildung 3.3.: Vergleich der Heizverläufe ohne und mit Wärmeübergang nach Bargende / $n=2000$ pmi= 3bar $\text{AGR}=0$ $\lambda=1$

Zur Bestimmung der Wandwärmeverluste wurden verschiedene Modelle entwickelt, die für Diesel- und Ottomotoren in Abhängigkeit verschiedener Parameter den Wärmeübergangskoeffizienten α berechnen. Dieser ist Teil der newtonschen Wärmeübergangsgleichung (3.6).

$$q_w = \alpha A (T - T_w) \quad (3.6)$$

Zu den bekanntesten Ansätzen gehören:

- Hohenberg (Diesel)
- Woschni (Diesel)
- Bargende (Otto)

In dieser Arbeit wurde der Ansatz nach Bargende verwendet, da dieser explizit für Ottomotoren entwickelt wurde und zu den aktuellsten Ansätzen zählt.

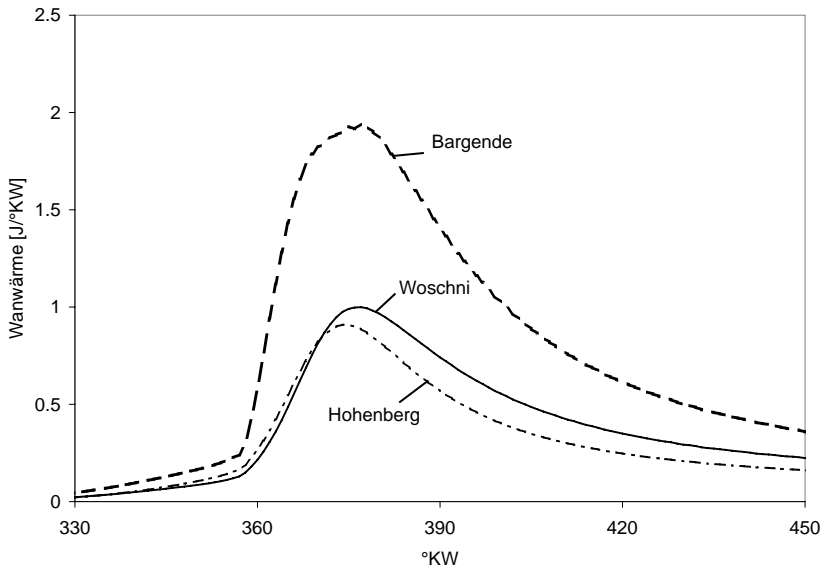


Abbildung 3.4.: Vergleich der Ansätze zur Berechnung der Wandwärmeverluste / $n=2000$ pmi=3bar AGR=0 $\lambda=1$

Innerhalb der Arbeit konnte die Summe aus Heizverlauf mit der Gaskalorik nach dem Komponentenansatz und dem Wärmeübergangsmodell nach Bargende in den untersuchten Punkten ca 98% der eingesetzten Energie aus der gravimetrischen Kraftstoffmassenbestimmung wiedergeben.

Die verbleibenden zwei Prozent lassen sich der Leckage sowie Mess- und Modellungenauigkeiten zuordnen.

Zusammenfassend muss betont werden, dass es für die Erstellung eines empirischen Modells keine Rolle spielt, welcher der beiden Algorithmen genutzt wird, da beide in jedem Fall reproduzierbare Ergebnisse liefern. Es muss jedoch für die Modellbildung und –nutzung immer derselbe Algorithmus angewandt werden, da es sonst zu erheblichen Differenzen am Modellausgang kommen kann.

3.2. Abgasanalyse

3.2.1. Stationäre Abgasanalyse

Einen Überblick über die verwendete Abgasanalyse gibt Tabelle 3.2.

Komponente	Gerät	heiß / kalt
<i>HC</i>	ABB FID	heiß
<i>NO</i>	ECOPHYSICS CLD 700EL ht	heiß
<i>NO₂</i>	ECOPHYSICS CLD 700EL ht	heiß
<i>CO</i>	Horriba MEXXA 9400	kalt
<i>CO₂</i>	Horriba MEXXA 9400	kalt
<i>O₂</i>	Horriba MEXXA 9400	kalt

Tabelle 3.2.: Typen der stationären Abgasmesstechnik

Diese Abgasmesstechnik dient dazu, die Abgaskonzentration in Stationärpunkten zu bestimmen. Für das Modell notwendig sind tatsächlich lediglich die Stickoxidkonzentrationen. Die übrigen Komponenten wurden zur Referenzpunktkontrolle, AGR-Bestimmung und sekundären Lambda-bestimmung nach [Bre79] genutzt.

3.2.2. Dynamische Abgasanalyse

Im realen Motorbetrieb kommt der Stationärbetrieb in der Regel nicht vor, d.h., die Betriebsparameter Last und Drehzahl ändern sich ständig. Um zu verifizieren, wie gut das Modell im dynamischen Betrieb die NO-Emissionen des Motors wiedergibt wurde eine dynamische Abgasmessanlage vom Typ Horiba Mexxa FRC eingesetzt.

Dieser ebenfalls als CLD (vgl. [Hoh07b]) arbeitende Stickoxidanalysator kann im Gegensatz zu dem für Stationärmessungen eingesetzten Typ lediglich die Komponente *NO* messen. Darüber hinaus handelt es sich um einen „Kalten CLD“. Dieser kühlt das Abgas auf ca. 5°C ab, um das Wasser aus dem Abgas abzuscheiden und so trockenes Messgas zu analysieren. Daher muss an den ermittelten Messwerten eine Feuchtekorrektur vorgenommen werden. Diese ist in [Gär01] ausführlich behandelt.

Die Ansprechzeit der dynamischen Abgasmessanlage wurde mit Hilfe eines Umschaltventils am Messeingang des Analysators ermittelt. Hierbei wurde von Umgebungsluft auf druckloses Kalibriergas Stickstoffmonoxid mit einer Konzentration von 4500 ppm umgeschaltet. Das Umschaltventil besitzt ein sehr kleines Eigenvolumen um den Einfluss von Mischungsvorgängen zu minimieren.

In Abbildung 3.5 ist der Verlauf der gemessenen Stickstoffmonoxidkonzentration über der Zeit aufgetragen, der sich beim Umschalten von Umgebungsluft auf das Kalibriergas ergibt.

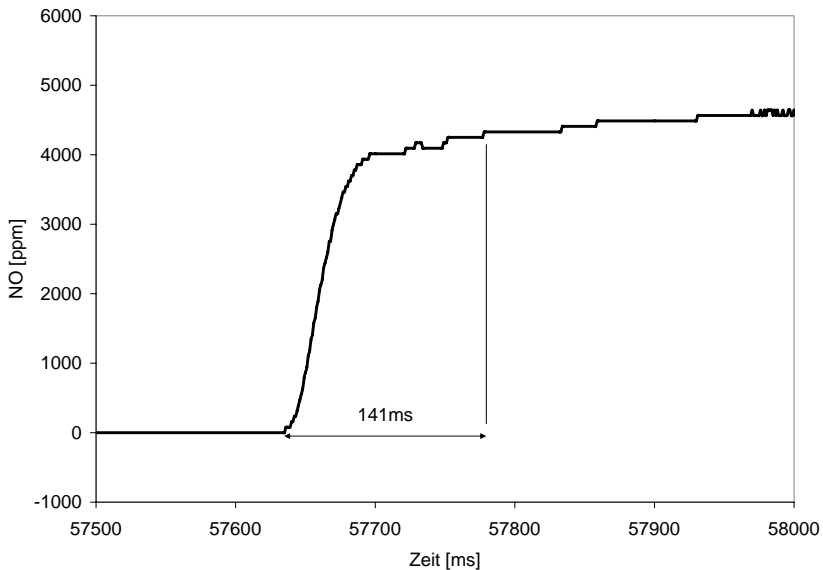


Abbildung 3.5.: Ansprechzeit des dynamischen Stickstoffmonoxid Analysators Horiba MEXXA FRC

Die T90 Zeit (die Zeit bis zum Erreichen von 90% des Messendwertes) beträgt 141ms.

Ein Verbrennungsmotor führt bei 2000 min^{-1} pro Zylinder 16.6 Verbrennungen pro Sekunde durch. Das heißt von Verbrennung zu Verbrennung

vergehen ca. 60 ms bei dieser Drehzahl. Es zeigt sich, dass die Geschwindigkeit des Analysators zur vollständigen Auflösung des zylinderindividuellen Abgasverlaufes nicht ausreicht. Dennoch ist diese Ansprechzeit im Vergleich zu der Ansprechzeit herkömmlicher Analysatoren, die im Bereich von Sekunden liegt, schnell.

Zusammengefasst bedeutet dies für die Benutzung des schnellen CLDs, dass die Fragestellungen nach der Stickoxidkonzentration während eines Lastsprungs ausreichend gut beantwortet werden kann, ohne jedoch in der Lage zu sein die zyklischen Schwankungen einer ottomotorischen Verbrennung voll auflösen zu können.

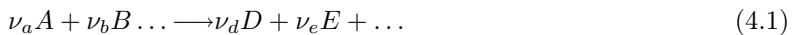
4. Reaktionskinetische Stickoxidmodellierung

4.1. Reaktionskinetik und chemisches Gleichgewicht

Um die Ursachen für Veränderungen der Stickoxidemissionen im Betriebsbereich der ottomotorischen Verbrennung genauer analysieren zu können, sollen diese simuliert werden.

Zur Durchführung einer thermodynamischen und chemischen Simulation ist es notwendig, die Methoden und Gesetzmäßigkeiten der Gleichgewichtsthermodynamik anzuwenden. Selbstverständlich unterliegt jede chemische Reaktion einer endlichen Geschwindigkeit, die durch die chemische Reaktionskinetik beschrieben wird.

Allgemein werden chemische Reaktionen mit den beteiligten Edukten A , B sowie den Produkten D und E mit folgendem Formelzusammenhang (4.1) beschrieben.



Zur Beschreibung des zeitlichen Zusammenhangs einer chemischen Reaktion dient Formel (4.2). Diese formuliert innerhalb einer chemischen Reaktion (4.1) die zeitliche Änderung der Konzentration eines an der Reaktion beteiligten Stoffes [MSSO04],[WMD01].

Eine chemische Reaktion besteht immer aus einer Vorwärts- und einer Rückwärtsreaktion. Hierbei bildet k_f die Geschwindigkeitskonstante für die

Vorwärts- und k_r die Geschwindigkeitskonstante für die Rückwärtsreaktion. Die Werte in den eckigen Klammern stellen die molaren Konzentrationen der Produkte und Edukte dar.

$$\frac{d[C]}{dt} = \nu_c \left(\underbrace{k_f [A]^{\nu_a} [B]^{\nu_b}}_{\text{vorwärts}} - \underbrace{k_r [C]^{\nu_c} [D]^{\nu_d}}_{\text{rückwärts}} \right) \quad (4.2)$$

Die Geschwindigkeitskonstanten k_f und k_r werden mit dem von Savante Arrhenius vorgeschlagenen Ansatz zur Beschreibung von Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten dargestellt. Diese Gleichung (4.3) aus dem Ende des 19. Jahrhundert beschreibt den Zusammenhang von Reaktionstemperatur und -geschwindigkeit mittels einer Exponentialfunktion.

$$k = AT^b e^{(-\frac{E_A}{R_m T})} \quad (4.3)$$

k	: Geschwindigkeitskonstante	$[cm^3/mol \cdot s]$
A	: Stoßzahl	$[-]$
T	: Temperatur	$[^\circ K]$
b	: Temperaturbeiwert	$[-]$
E_A	: Aktivierungsenergie	$[J/mol]$
R_m	: universelle Gaskonstante	$[J/K \cdot mol]$

Die Ermittlung dieser Größen erfolgt generell auf experimentellem Wege. Die Daten werden in Tabellenwerken für die jeweiligen chemischen Reaktionen festgehalten z.B. [WMD01].

Aufgrund des negativen Vorzeichens im Exponenten nimmt der Exponentialteil des Ansatzes für eine sehr kleine Aktivierungsenergie oder eine sehr hohe Temperatur den Wert 1 an.

Die Geschwindigkeit der Reaktion wird dabei grundsätzlich von der Stoßzahl A bestimmt und mittels der Reaktionstemperatur T skaliert. Daher

sind die Geschwindigkeitskonstanten bei sich ändernden Reaktionstemperaturen immer neu zu berechnen.

In seiner ursprünglichen Form enthielt der Arrhenius Ansatz noch nicht die Temperaturabhängigkeit des präexponentiellen Faktors A . Es hat sich jedoch gezeigt, dass die Stofzzahl A eine gewisse Temperaturabhängigkeit aufweist, die sich über den Zusatzterm T^b abbilden lässt [WMD01].

In [Gär01] findet sich eine Zusammenstellung der in der Literatur verwandten temperaturabhängigen Geschwindigkeitskonstanten für den erweiterten Zeldovic-Mechanismus. Hier werden die Einflüsse und Erfahrungen mit den unterschiedlichen Geschwindigkeitskonstanten diskutiert.

Im Ergebnis werden in [Gär01] die Geschwindigkeitskonstanten nach [PH73] verwendet. Es wird darauf hingewiesen, dass andere Autoren andere Konstanten erfolgreicher eingesetzt haben.

In dieser Arbeit werden ebenfalls die Geschwindigkeitskonstanten nach [PH73] eingesetzt, da die Reaktionskinetik in dieser Arbeit im Wesentlichen der qualitativen Ermittlung der Einflüsse auf die Stickoxidbildung dienen soll und nicht der quantitativen Simulation.

Aufgrund der Verbreitung dieser Konstanten ist damit eine Vergleichbarkeit zu bisherigen Arbeiten gewährleistet.

Eine chemische Reaktion läuft grundsätzlich in beide Richtungen ab. Hin- und Rückreaktion finden während der chemischen Reaktion fortwährend statt.

Die resultierende Richtung einer chemischen Reaktion wird durch das Konzentrationsverhältnis aus Edukten und Produkten im Gleichgewichtspunkt bestimmt.

Das Gleichgewicht bildet den scheinbaren Endpunkt der chemischen Reaktion, wobei sich lediglich Hin- und Rückreaktion die Waage halten (4.4).

$$k_f [A]^{\nu_a} [B]^{\nu_b} = k_r [D]^{\nu_d} [E]^{\nu_e} \quad (4.4)$$

Für den Gleichgewichtszustand einer chemischen Reaktion kann nach dem Massenwirkungsgesetz [Vog89] [May84] eine Gleichgewichtskonstante angegeben werden, die bei gegebenen Umgebungsbedingungen die Molaritäten im Gleichgewichtszustand darstellt. Für die Gleichgewichtskonzentration K_c gilt nach [MSSO04] folgender Zusammenhang (4.5).

$$\frac{k_f}{k_r} = \frac{[C]^{\nu_c}[D]^{\nu_d}}{[A]^{\nu_a}[B]^{\nu_b}} \equiv K_c \quad (4.5)$$

Für die Berechnung des Gleichgewichts von Gasen ist es vorteilhaft die Gleichgewichtskonstante K_p abhängig von den Partialdrücken zu verwenden.

$$K_p = \frac{[p_C]^{\nu_c}[p_D]^{\nu_d}}{[p_A]^{\nu_a}[p_B]^{\nu_b}} \quad (4.6)$$

Der Zusammenhang zwischen Molaritäten und Partialdrücken ist dabei durch die allgemeine Gasgleichung gegeben.

$$p_A = c_A \cdot R_m \cdot T \quad (4.7)$$

Die Entstehung von Stickstoffmonoxid im „post-flame“ Bereich ist unter anderem abhängig von den Konzentrationen der an dem Verbrennungsprozess beteiligten Stoffen.

Hierfür gilt es ein Reaktionsschema zu wählen, das den Verbrennungsprozess in ausreichend hohem Maße repräsentiert.

Ein Vergleich verschiedener Arbeiten mit unterschiedlichen Reaktionsschemata ist auf Tabelle 4.1 dargestellt. Hierin sind die Verfasser, die Stoffe und Anzahl der Gleichungen aufgelistet.

Nach eingehenden Vergleichen wurde, zur Beschreibung der Gleichgewichtsreaktionen in dieser Arbeit das Reaktionsschema nach dem Vorschlag von

Name	Stoffe	GG Gleichungen	CO_2	CO	H	H_2	H_2O	N	N_2	NO	NO_2	N_2O	O	O_2	OH
Pattas/H.	8	8	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x
Nietschke	8	6	x	x	x	x	x		x	x			x	x	x
Heider	7	6	x	x	x	x	x						x	x	x
Stiesch	8	5	x	x	x	x	x						x	x	x
Gärtner	9	8	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x
Gärtner	13	9	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Grill	11	7	x	x	x	x	x	x	x	x			x	x	x

Tabelle 4.1.: Übersicht der Gleichgewichtsreaktionsschemata anderer Arbeiten

Grill [Gri06] übernommen. Diese stellt in der Auflistung die modernste Arbeit dar.

In [Gri06] werden 11 Spezies mittels 7 Reaktionsgleichungen beschrieben. Ein Vergleich mit [Gär01] zeigt eine gute Übereinstimmung der Gleichgewichtskonzentrationen der beteiligten Stoffe.

Bei diesen Reaktionsschemata wird innerhalb der motorischen Verbrennung das Erreichen des Gleichgewichtszustandes vorausgesetzt. D.h., die chemischen Reaktionen laufen im Vergleich zu den sich ändernden Randbedingungen wie Druck und Temperatur sehr viel schneller ab.

Das gewählte Reaktionsschema für die Gleichgewichtsrechnung setzt sich aus folgenden 7 Gleichungen zusammen:





Zur Bestimmung der druckbezogenen Gleichgewichtskonstanten wurden in der vorliegenden Arbeit Daten aus der thermochemischen Datenbank nach [Bur01] eingesetzt.

Hierbei werden die Gleichgewichtskonstanten in Abhängigkeit der Temperatur mittels eines polynomialen Modells abgebildet. Die sieben Koeffizienten für die jeweilige Einzelreaktion werden einem Tabellenwerk entnommen.

Mit Hilfe der Daten dieses Tabellenwerks können darüber hinaus mit den gleichen Koeffizienten der jeweiligen Reaktionen auch andere Größen wie Wärmekapazität, Enthalpie oder Entropie bestimmt werden. Die verwandten Koeffizienten sind im Anhang zur Gleichgewichtsrechnung dargestellt.

$$K_p = \exp(\Delta a_1(\ln T - 1) + \frac{\Delta a_2 \cdot T}{2} + \frac{\Delta a_3 \cdot T^2}{6} + \frac{\Delta a_4 \cdot T^3}{12} + \frac{\Delta a_5 \cdot T^4}{20} - \frac{\Delta a_6}{T} + \Delta a_7) \quad (4.15)$$

Im Folgenden werden nach verschiedenen Umformungen und einer iterativen Rechnung alle Gleichungen nur noch von p_O , p_N und p_H abhängig gemacht. So können über die temperaturabhängigen Gleichgewichtsbeziehungen (4.16) bis (4.22) alle übrigen Partialdrücke bestimmt werden.

Zusammen mit den Reaktionsgleichungen (4.8) bis (4.14) und Gleichung (4.6) können nach dem Massenwirkungsgesetz folgende sieben Gleichungen aufgestellt werden:

$$K_{p,1} = \frac{p_{CO}\sqrt{p_{O_2}}}{p_{CO_2}} \quad (4.16)$$

$$K_{p,2} = \frac{p_{H_2O}}{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}} \quad (4.17)$$

$$K_{p,3} = \frac{p_{OH}}{\sqrt{p_{H_2}} \sqrt{p_{O_2}}} \quad (4.18)$$

$$K_{p,4} = \frac{p_H}{\sqrt{p_{H_2}}} \quad (4.19)$$

$$K_{p,5} = \frac{p_O}{\sqrt{p_{O_2}}} \quad (4.20)$$

$$K_{p,6} = \frac{p_N}{\sqrt{p_{N_2}}} \quad (4.21)$$

$$K_{p,7} = \frac{p_{NO}}{\sqrt{p_{N_2}} \sqrt{p_{O_2}}} \quad (4.22)$$

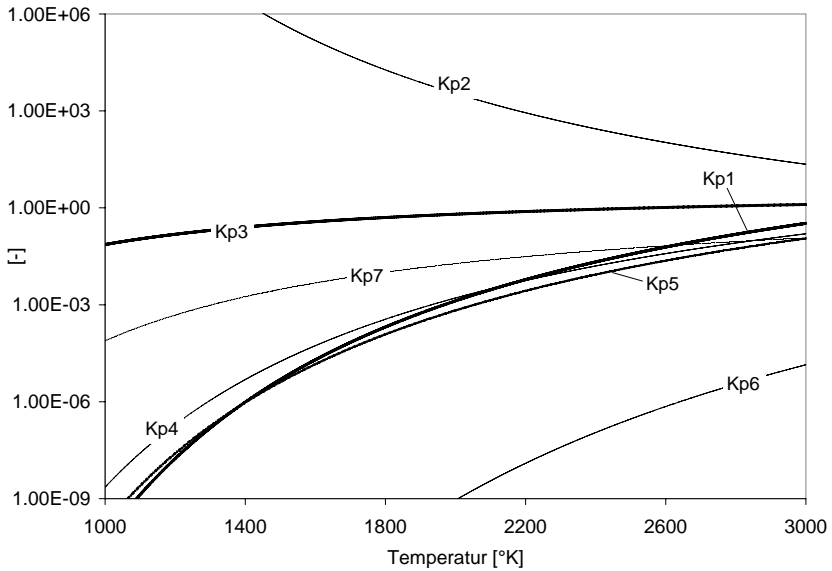


Abbildung 4.1.: Verlauf der temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten

In Abbildung 4.1 sind die temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten dargestellt. Auffällig erscheint der Verlauf von Kp_2 , der im gesamten Temperaturspektrum größer 1 ist und mit sinkender Temperatur größer wird.

Gleiches gilt für Kohlendioxid in Gleichung (4.16), in der Kp_1 reziprok verzeichnet ist. Dies bedeutet, dass mit zunehmender Temperatur die Dissoziation von Wasser und Kohlendioxid zunehmen muss.

Die verbleibenden erforderlichen Gleichungen bzw. Beziehungen der einzelnen Komponenten untereinander, die notwendig sind, um die Partialdrücke bzw. Konzentrationen der betrachteten Komponenten ermitteln zu können, ergeben sich aus Bilanzierungen der chemischen Grundelemente.

Dies ist möglich, weil der Arbeitstakt der motorischen Verbrennung idealisiert einen geschlossenen Vorgang darstellt [BK98] [Hoh07b]. Aus diesem Grund bleibt die Anzahl an Atomen einzelner Elemente unabhängig von chemischen oder physikalischen Vorgängen immer gleich.

Die Verhältnisse der Partialdrucksummen einzelner Elemente untereinander bleiben ungeachtet ihrer Absolutwerte ebenfalls konstant. Die Summe der Partialdrücke entspricht selbstverständlich dem Zylinderdruck p_{Zyl} .

$$p_{Zyl} = p_{CO_2} + p_{CO} + p_{O_2} + p_{H_2O} + p_{H_2} + p_{OH} + p_H + p_O + p_{N_2} + p_N + p_{NO} \quad (4.23)$$

Für die weitere Rechnung werden drei Atomzahlverhältnisse betrachtet. Diese werden in der folgenden iterativen Lösung der Gleichgewichtsrechnung Verwendung finden. Sie ergeben sich aus den Atombilanzen und den Partialdrucksummen der jeweiligen Elemente. Diese Betrachtung trägt der Tatsache Rechnung, dass die elementweisen Atomzahlen und Partialdrücke konstant bleiben (geschlossenes System). Gleichung (4.24) bis (4.26) setzen die Atomzahlverhältnisse ins Verhältnis zu den Partialdrücken.

$$\frac{N_O}{N_N} = \frac{2p_{CO_2} + p_{CO} + p_{O_2} + p_{H_2O} + p_{OH} + p_O + p_{NO}}{2p_{N_2} + p_N + p_{NO}} \quad (4.24)$$

$$\frac{N_C}{N_O} = \frac{2p_{CO_2} + p_{CO}}{2p_{CO_2} + p_{CO} + p_{O_2} + p_{H_2O} + p_{OH} + p_O + p_{NO}} \quad (4.25)$$

$$\frac{N_H}{N_O} = \frac{2p_{H_2O} + p_{H_2} + p_{OH} + p_H}{2p_{CO_2} + p_{CO} + p_{O_2} + p_{H_2O} + p_{OH} + p_O + p_{NO}} \quad (4.26)$$

Da Verbrennungsluftverhältnis sowie Kraftstoffzusammensetzung bekannt sind, können als weitere bekannte Größen die Atomzahlverhältnisse direkt bestimmt werden. Für einen beliebigen Kraftstoff, der mit Luft verbrannt wird, ergibt sich:

$$C_x H_y O_z + \lambda \left(x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} \right) (O_2 + 3.773 N_2) \rightarrow \dots \quad (4.27)$$

Um die Darstellung der Gleichung zu vereinfachen wird mit der Substitution (4.28) fortgefahren.

$$\xi = 2\lambda \left(x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} \right) \quad (4.28)$$

Für die einzelnen Atomzahlverhältnisse ergeben sich in Abhängigkeit des verwandten Kraftstoffs und des Luftzahlverhältnisses folgende Terme:

$$\frac{N_O}{N_N} = \frac{z + \xi}{3.773\xi} \quad (4.29)$$

$$\frac{N_C}{N_O} = \frac{x}{z + \xi} \quad (4.30)$$

$$\frac{N_H}{N_O} = \frac{y}{z + \xi} \quad (4.31)$$

Die nun folgende Iterationsrechnung geht auf eine Arbeit von Vogt [Vog75] zurück und wurde von [Gri06] zur Berechnung von Stoffwerten wieder aufgegriffen und erweitert.

Das häufig genannte Newton-Verfahren zur Lösung der Gleichgewichtsrechnung hat laut [Gär01] und [Gri06] erhebliche Geschwindigkeitsdefizite sowie Konvergenzprobleme bei schlechten Startwerten. Das in [Gri06] verwandte Verfahren stellt ein sehr robustes und schnelles Verfahren zur Berechnung des Gleichgewichtszustandes dar.

Zu beachten ist, dass die Berechnungsvorschrift, wie sie hier dargestellt ist, für Drücke die Einheit bar vorsieht!

Im Folgenden soll der Ablauf der Rechnung kurz skizziert werden. Ziel ist es, die Quadratwurzeln der Partialdrücke von Wasserstoff (H_2), Sauerstoff (O_2) und Stickstoff (N_2) zu berechnen, um mit diesen und den Gleichgewichtskonstanten die übrigen Partialdrücke zu ermitteln.

Hierfür werden aus den Gleichungen des Massenwirkungsgesetzes (4.16) bis (4.22) und den sechs Gleichungen für das Atomzahlverhältnis (4.24) bis (4.26) und (4.29) bis (4.31) Terme für $\sqrt{p_{H_2}}$ (4.32) und $\sqrt{p_{N_2}}$ (4.33) erstellt, die lediglich von den Gleichgewichtskonstanten, den ebenfalls bekannten Atomzahlverhältnissen sowie einem Startwert für den Sauerstoffanteil abhängen. Diese bilden die äußere Iterationsschleife.

$$\sqrt{p_{H_2}} = \frac{-K_{p,3}\sqrt{p_{O_2}} - K_{p,4} + \sqrt{(K_{p,3}\sqrt{p_{O_2}} + K_{p,4})^2 + 8(1 + K_{p,2}\sqrt{p_{O_2}})\frac{N_H}{N_O}N_O^*}}{4(1 + K_{p,2}\sqrt{p_{O_2}})} \quad (4.32)$$

$$\sqrt{p_{N_2}} = -\frac{1}{4}(K_{p,6} + K_{p,7}\sqrt{p_{O_2}}) + \sqrt{\frac{1}{16}(K_{p,6} + K_{p,7}\sqrt{p_{O_2}})^2 + \frac{N_N}{2N_O}N_O^*} \quad (4.33)$$

Rechenablauf Gleichgewichtslöser

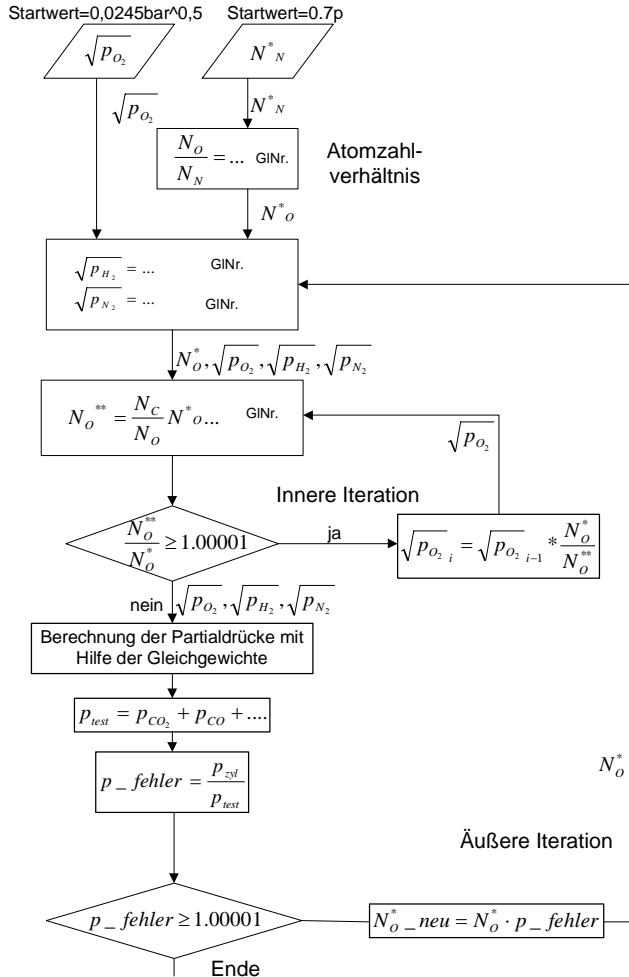


Abbildung 4.2.: Gleichgewichtsrechnung Flussdiagramm

Zur Verbesserung des Sauerstoffanteils dient die innere Iterationsschleife mit Gleichung (4.34).

Mit den Atomzahl- und Partialdruckverhältnissen aus (4.30) und (4.25) wird in Abhängigkeit von $\sqrt{p_{O_2}}$ und N_O^* die Zwischengröße N_O^{**} berechnet.

In weiteren Durchläufen wird $\sqrt{p_{O_2}}$ iterativ solange mit dem relativen Fehler N_O^*/N_O^{**} multipliziert und ein neues N_O^{**} ermittelt, bis sich N_O^{**} dem Wert für N_O^* weit genug angenähert hat. Sodann wird dieser neue Wert für $\sqrt{p_{O_2}}$ zusammen mit den Partialdrücken für Wasserstoff und Stickstoff zur Berechnung der übrigen Partialdrücke verwendet.

Diese werden gemäß (4.23) zu p_{test} aufsummiert und mit dem tatsächlichen Zylinderdruck p_{Zyl} verglichen. Der relative Fehler p_{Zyl}/p_{test} dient zur Bildung eines neuen N_O^* .

Ist der relative Fehler klein genug, wird die Berechnung an dieser Stelle abgebrochen. Der Rechenvorgang ist alternativ in Abbildung 4.2 nochmals als Flussdiagramm dargestellt.

$$N_O^{**} = \frac{N_C}{N_O} N_O^* \frac{2 \frac{\sqrt{p_{O_2}}}{K_{p,1}} + 1}{\frac{\sqrt{p_{O_2}}}{K_{p,1}} + 1} + 2p_{O_2} + K_{p,2} p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}} + K_{p,3} \sqrt{p_{O_2}} \sqrt{p_{H_2}} + K_{p,5} \sqrt{p_{O_2}} + K_{p,7} \sqrt{p_{N_2}} \sqrt{p_{O_2}} \quad (4.34)$$

In Abbildung 4.3 sind beispielhaft in logarithmischer Auftragung die Gaskonzentrationen als Ergebnis der Gleichgewichtsrechnung für eine Lambdavarisation bei einem Behälterdruck von 1 bar und einer Temperatur von 2500°K dargestellt.

Gut zu erkennen ist der Umschwung der Charakteristik im stöchiometrischen Punkt. Im Luftmangelgebiet steigen die Konzentrationen der Produkte unvollständiger Verbrennung (CO , H_2 , H) an, während die Konzentration von Sauerstoff und Kohlendioxid zurückgeht.

Für den Bereich des Luftüberschusses zeigt sich für diese Komponenten der umgekehrte Fall.

Zur Überprüfung der Richtigkeit der Gleichgewichtsrechnung wurden verschiedene Variationsrechnungen für Druck, Lambda und Reaktortemperatur mit unterschiedlichen Randbedingungen durchgeführt.

Die Ergebnisse wurden mit den Daten aus der vorliegenden Literatur verglichen. Der Vergleich zeigt eine gute Übereinstimmung, soweit dies die Ablesbarkeit der Diagramme zuließ.

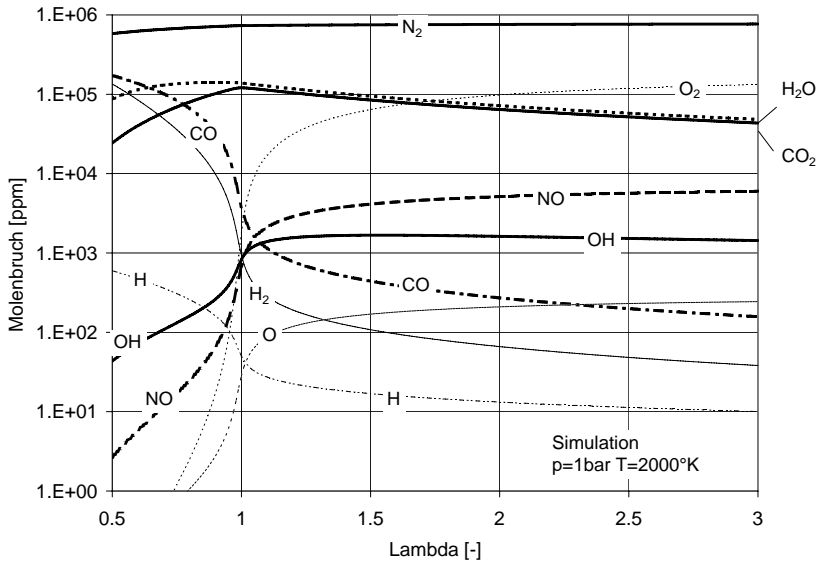


Abbildung 4.3.: Gleichgewichtsrechnung Lambdavariation

Verglichen wurden die Arbeiten von [BCB03], [Gri06], [PKS02]. Zum Teil verfügen diese Arbeiten über recht große Abbildungen, die ein genaues Ablesen der Werte ermöglichen.

In Abbildung 4.4 ist die Variation der Reaktortemperatur dargestellt.

Wie zu erwarten war, steigt mit zunehmender Temperatur die Dissoziation der Komponenten an. Damit wird ein Teil der über den Tempera-

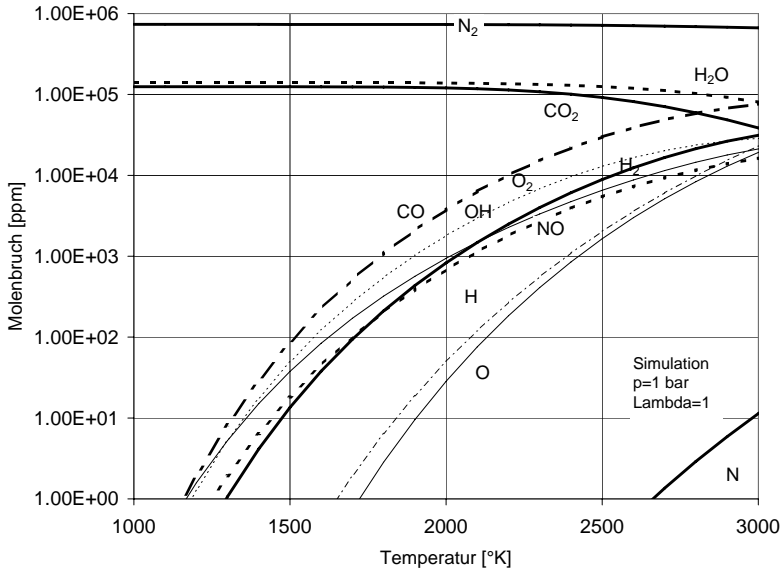


Abbildung 4.4.: Gleichgewichtsrechnung Temperaturvariation

uranstieg zugeführten Energie als Dissoziationsenergie im Gas gespeichert.

Dieses Verhalten sowie die Änderung der chemischen Zusammensetzung führen dazu, dass sich die Gaskonstante ebenfalls mit der Temperatur ändert [DeJ76].

Abbildung 4.5 zeigt den Konzentrationsverlauf über dem Reaktordruck.

Mit sinkendem Reaktordruck nimmt die Dissoziation von Wasser und Kohlendioxid zu. Dies ist aufgrund der logarithmischen Darstellung weniger gut zu erkennen als die Konzentrationsänderung der übrigen Reaktionspartner, die demzufolge ansteigt.

Eine direkte Auswirkung auf die Gleichgewichtskonstanten hat die Änderung des Reaktordrucks nicht zur Folge.

Die am Anfang des Kapitels vorangestellten Grundlagen zur chemischen Reaktionskinetik sollen nicht alleine die Grundlage für die Gleichgewichtsrechnung bilden.

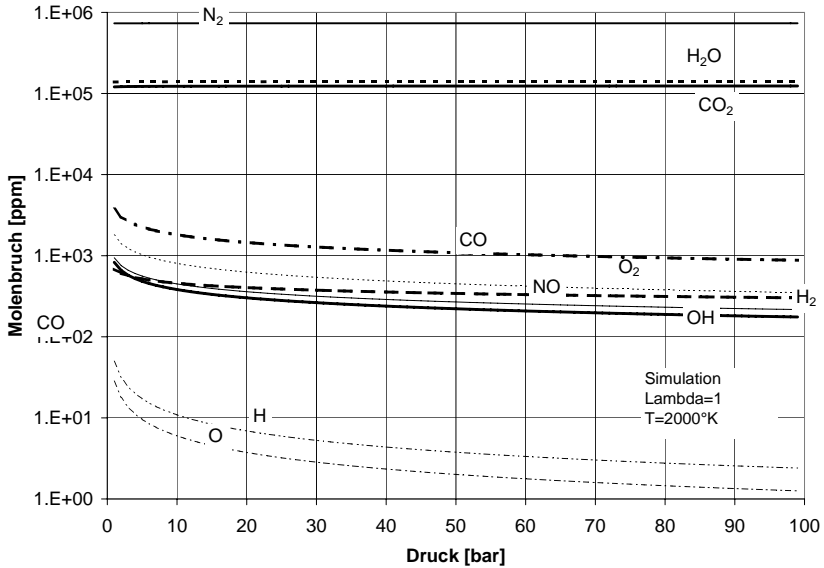


Abbildung 4.5.: Gleichgewichtsrechnung Druckvariation

Das chemische Reaktionssystem des Zeldovicmechanismus (vgl. Kapitel 4), kann für die Berechnung der Stickoxidkonzentrationen einer schnelllaufenden Verbrennungskraftmaschine nicht auf Basis der Gleichgewichtsrechnung erfolgen [PH73].

Die Reaktionen zur Bildung des Stickstoffmonoxids laufen im Verhältnis zu den übrigen betrachteten Reaktionen ca. eine Zehnerpotenz langsamer ab. Daher ist eine Lösung der Gleichung (4.2) für den Zeldovic Mechanismus notwendig. Wie bereits in Kapitel 2.2 erwähnt, werden für die Konstanten der Vor- und Rückreaktionen die Geschwindigkeitskonstanten nach 2.2 verwandt. Gleichung (4.2) ergibt sich für den Zeldovic-Mechanismus folgendermaßen.

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} = & k1_f[N_2][O] + k2_f[O_2][N] + k3_f[OH][N] \\ & - k1_r[NO][N] - k2_r[NO][O] - k3_r[NO][H] \end{aligned} \quad (4.35)$$

Analog zu (4.34) wird auch die Gleichung für die Änderung des atomaren Stickstoffs aufgestellt und zu null gesetzt.

$$\frac{d[N]}{dt} \approx 0 \quad (4.36)$$

Die Lösung der Gleichung erfolgt nach dem Runge-Kutta-Verfahren. Näheres dazu kann z.B. [Pap91] entnommen werden.

Um Einzeleinflüsse auf die thermische Stickoxidbildung erarbeiten zu können, soll die Zahl der Freiheitsgrade der Simulation erst nach und nach erhöht werden. Da aus der Literatur bekannt ist, dass im Allgemeinen Temperatur, Zeit und Sauerstoffangebot einen großen Einfluss auf die Stickoxidbildung haben, wird zunächst auf die Simulation einer Hubkolbenmaschine verzichtet.

Die zeitlich ständig wechselnden Zustände von Druck und Temperatur würden eine genaue Analyse behindern. Daher wurde begonnen, die Stickoxidbildung in einem theoretischen, isochoren thermischen Reaktor zu untersuchen. So können alle Parameter getrennt voneinander untersucht werden. Die Berechnungen umfassen die Variation folgender Parameter:

- Zeit
- Druck
- Temperatur
- Luft-/Kraftstoffverhältnis

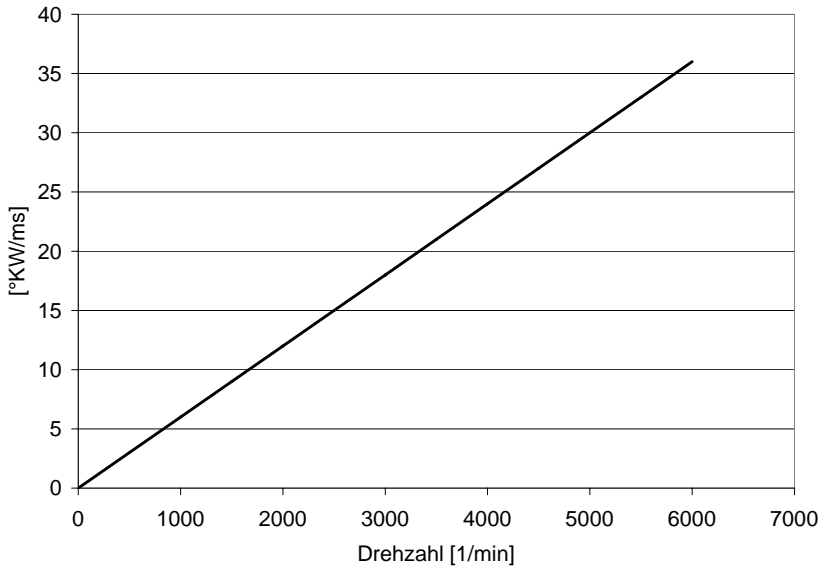


Abbildung 4.6.: Zeitverhältnisse in einer Hubkolbenmaschine

Um eine Vorstellung über die Zeitverhältnisse zu geben, die in einer schnelllaufenden Hubkolbenmaschine herrschen, ist in Abbildung 4.6 die Winkelgeschwindigkeit über der Drehzahl aufgetragen. Diese Darstellung soll helfen, den Zeitmaßstab der Bildungsgeschwindigkeit von Stickstoffmonoxid besser einordnen zu können.

In Abbildung 4.7 ist die Stickstoffmonoxidkonzentration über der Temperatur und Zeit für ein Gemisch bei 40 bar und Lambda 1 aufgetragen.

Dieser Punkt wurde gewählt, weil dies dem Druck und Luft- /Kraftstoffverhältnis in der höheren Teillast der ottomotorischen Verbrennung entspricht. Zusätzlich ist die Isolinie entlang des Gleichgewichtszustandes aufgetragen. An ausgewählten Punkten ist außerdem die Drehzahl angegeben, die notwendig wäre, um innerhalb von 1°KW den Gleichgewichtszustand zu erreichen. An den kleinen Drehzahlen von nur 18 bis 8 min^{-1} wird die geringe

Reaktionsgeschwindigkeit der Stickoxidbildung deutlich.

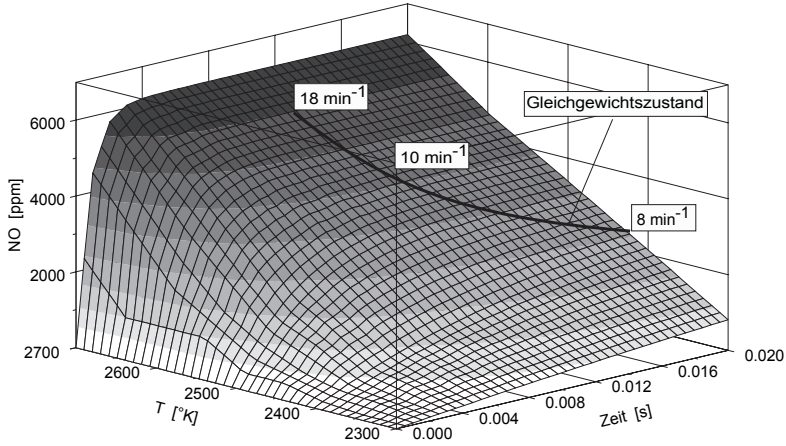


Abbildung 4.7.: Thermischer Reaktor, Temperaturvariation

Hieraus wird ersichtlich, dass bei üblichen Verbrennungskraftmaschinen das chemische Gleichgewicht der Zeldovic Reaktionen während eines Arbeitstaktes auch nicht annäherungsweise erreicht werden kann.

In Abbildung 4.8 ist die Zeitskala für den Bereich der motorischen Verbrennung dargestellt.

Entlang der Drehzahllinien ist in Abhängigkeit von der Temperatur die NO Bildung innerhalb eines Kurbelwinkelgrades aufgelöst aufgetragen. Hierbei wird davon ausgegangen, dass die NO Konzentration zuvor null beträgt. Dies stellt den günstigsten Fall dar, da die Reaktionsgeschwindigkeit bei konstanter Temperatur mit zunehmender Konzentration nachlässt, wie aus Abbildung 4.7 hervorgeht.

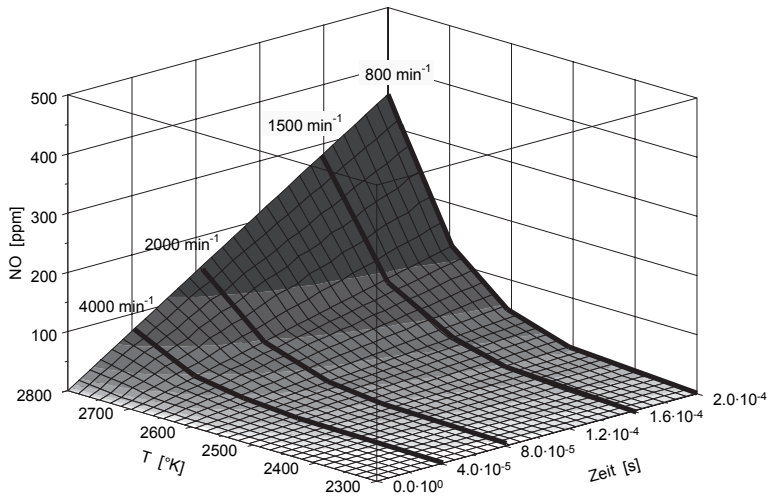


Abbildung 4.8.: Thermischer Reaktor, Temperaturvariation mit Drehzahlisolinien im Zeitfenster von 1°KW

Die thermische Stickoxidbildung im Zeitbereich einer Hubkolbenmaschine ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Hierbei wird für das betrachtete Zeitinkrement wieder davon ausgegangen, dass die Stickoxidkonzentration zuvor null beträgt.

Hierbei zeigt sich, dass die Temperaturen mit 2400°K sehr hoch sein müssen, damit es zu einer spürbaren Bildung von Stickoxid kommen kann. Im realen Motorbetrieb beträgt die Stickoxidkonzentration nur sehr selten null (z.B. Motorstart).

Hieraus ergibt sich aufgrund der exponentiellen Bildungscharakteristik von Stickstoffmonoxid (vgl. Abschnitt 4.1- Arrheniusansatz), dass die reale Zunahme an NO im betrachteten Zeit- und Temperaturbereich geringer ist als im Diagramm dargestellt.

4. Reaktionskinetische Stickoxidmodellierung

Eine entscheidende Frage ist, wie das NO, das während der Verbrennung unter sehr hohen Temperaturen entstanden ist, beim Abkühlen des Rauchgases wieder zurückgebildet wird.

Um die Frage näher zu beleuchten, sind in Abbildung 4.9, ausgehend von einer konstanten Konzentration von 10000 ppm NO, bei verschiedenen Temperaturen die Rückreaktionen aufgetragen. Diese ergeben sich im thermischen Reaktor, da die Startkonzentration über den Gleichgewichtskonzentrationen der jeweiligen Temperaturen liegen.

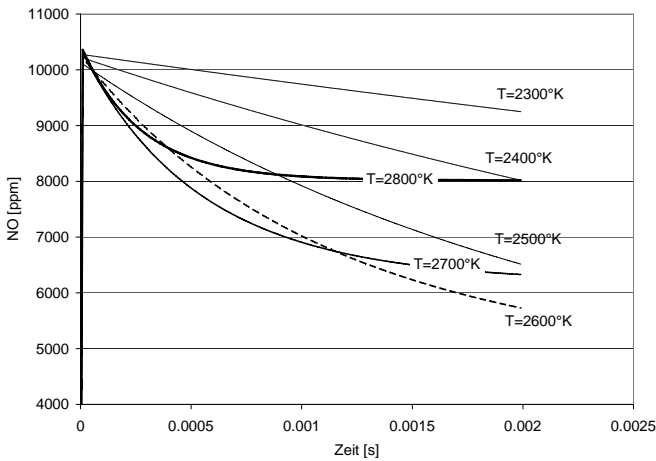


Abbildung 4.9.: Thermischer Reaktor, Temperaturvariation Rückreaktion

Es ist deutlich zu sehen, dass die Rückbildungsraten ebenso wie die Bildungsraten mit sinkender Temperatur kleiner werden. Dies bedeutet schließlich das Einfrieren der Reaktion bei sinkenden Temperaturen und damit einen Erhalt des NO bei Umgebungstemperatur.

Die Variation des Luftkraftstoffverhältnisses bestimmt die Konzentration des zur Verfügung stehenden Sauerstoffs (vgl. Abbildung 4.3).

Mit steigender Sauerstoffkonzentration nimmt ebenfalls die benötigte Zeit ab, welche notwendig ist, um den Gleichgewichtszustand zu erreichen (vgl. Abbildung 4.10). An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die mit

der Sauerstoffkonzentration steigende Stickoxidkonzentration im Gleichgewichtspunkt bei jeweils konstanter Temperatur erreicht wird.

Übliche Darstellungen im Bereich der Verbrennungskraftmaschinen zeigen bei magerem Luft- Kraftstoffverhältnis, dass die Stickoxidkonzentration abnimmt. Die Ursache hierfür ist das fallende Temperaturniveau durch die Wärmekapazität der zusätzlichen Luft.

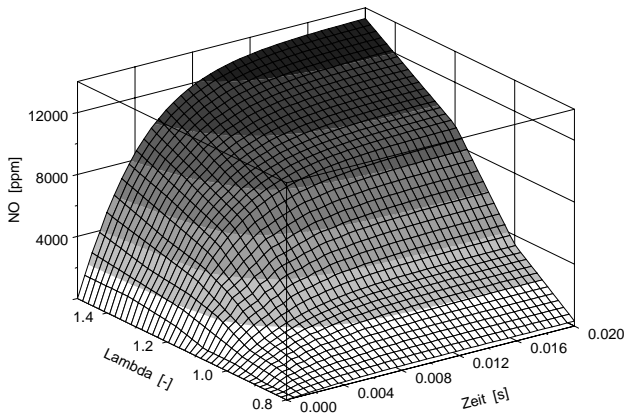


Abbildung 4.10.: Thermischer Reaktor, Lambdavariation

4.2. Thermodynamik

4.2.1. Zwei-Zonen-Modell

Zur Berechnung der thermodynamischen Größen innerhalb von reaktionskinetischen Modellen, die die Berechnung von Stickoxidemissionen zum Ziel haben, wird in vielen Quellen häufig eine Kreisprozessrechnung herangezogen [MSSO04]. Hierbei wird zusätzlich zur Stickoxidbildung die Verbrennung ausgehend von einer Einspritzung (Dieselmotor), mitberechnet.

Ziel dieser Arbeit soll es nicht sein, bestehende reaktionskinetische Modelle aufzugreifen und zu verbessern. Diese dienen lediglich der Analyse der Einflüsse auf die Stickoxidbildung. Daher wird auf eine Kreisprozessrechnung verzichtet und die Energiefreisetzung bzw. der Druckverlauf als gegeben vorausgesetzt.

Die einfachste Modellbildung, die den Brennraum einer Verbrennungskraftmaschine abbildet, ist das Einzonenmodell, welches den Brennraum als von der Kurbelwellenposition abhängiges Volumen darstellt $V(\varphi)$. Hierbei werden Druck, Temperatur sowie die Stoffwerte im gesamten Brennraum als gleich angenommen.

Ohne weitere Modellbildung können auf diese Weise lediglich Brennraummittelwerte aus einer gerechneten motorischen Verbrennung ermittelt werden. Dies stellt für die Simulation der Stickoxidemissionen ein Problem dar.

In Abbildung 4.11 ist die mittlere Brennraumtemperatur für die Berechnung mit einem Einzonenmodell aufgetragen. Die Brennraumtemperatur steigt in diesem Fall nicht über 1800 °K. Bei einem Vergleich mit Abbildung 4.4 zeigt sich, dass bei dieser niedrigen Temperatur keine nennenswerte Menge an Stickstoffmonoxid gebildet wird. Daraus ergibt sich, dass die getroffenen Vereinfachungen eines Einzonenmodells für die Berechnungen von Stickoxidemissionen ungeeignet sind.

Als verbessertes Modell bietet sich das Zweizonenmodell an, wie es auch in [PKS02], [MSSO04], [Hei96] und [Gär01] beschrieben ist. Dieses Modell gehört wie auch das Einzonenmodell zu den nulldimensionalen Modellen.

Hierbei wird der Brennraum in eine verbrannte und in eine unverbrannte Zone aufgeteilt, wie es in Abbildung 4.12 dargestellt ist.

Alle Berechnungen erfolgen mit skalaren Größen, ohne dass eine räumliche Orientierung der beiden Zonen existiert. Die Flammenfront bildet dabei eine unendlich dünne Reaktionszone, welche die beiden Zonen trennt. Während der Verbrennung tritt bei fortschreitender Flammenfront ein Massetransport von der unverbrannten in die verbrannte Zone auf sowie ein Wärmetransport in umgekehrter Richtung.

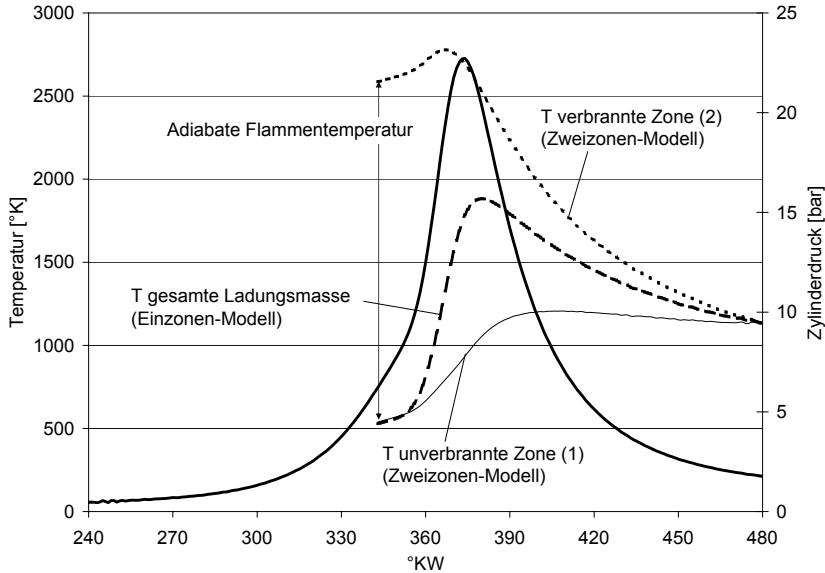


Abbildung 4.11.: Temperaturen bei der Berechnung mit Ein- und Zweizonenmodell

Diese Form der Modellabbildung bietet den Vorteil, dass sie dem ottomotorischen Verbrennungsablauf ähnlich ist. In [MSSO04] ist der Verbrennungsablauf eines Ottomotors zum Vergleich dargestellt.

Für die Formulierung des Zwei-Zonen-Modells sind verschiedene Annahmen bzw. Vereinbarungen in der genannten Literatur festgehalten [MSSO04], [Hei96], [PKS02], [Gär01].

- Der Druck der verbrannten Zone ist gleich dem Druck in der unverbrannten Zone

$$p_{Zyl}(\varphi) = p_{VZ}(\varphi) = p_{UZ}(\varphi) \quad (4.37)$$

- Die Summe der verbrannten und der unverbrannten Zone ist gleich dem Gesamtzylindervolumen, das sich für jede Kurbelwinkelposition

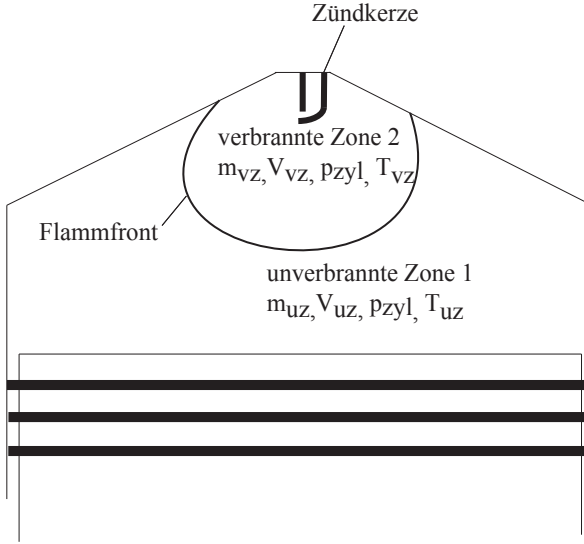


Abbildung 4.12.: Zwei-Zonen Modell Brennraum

aus der Triebwerkskinematik für eine Hubkolbenmaschine errechnen lässt [Hoh07b], [PKS02].

$$V_{Zyl}(\varphi) = V_{VZ}(\varphi) + V_{UZ}(\varphi) \quad (4.38)$$

- Die Summe der verbrannten und der unverbrannten Gasmasse ist gleich der Gesamtladungsmasse

$$m_{Zyl}(\varphi) = m_{VZ}(\varphi) + m_{UZ}(\varphi) \quad (4.39)$$

- Die Temperatur vor Beginn der Verbrennung ist in beiden Zonen gleich
- Die der verbrannten Zone zugeführten Energie ergibt sich aus der zugeführten Kraftstoffmasse und dem Heizwert des Kraftstoffs

$$dm_{Br} H_{u_{Br}} = dQ_b = dQ_{Bv} \quad (4.40)$$

- Das lokale und globale Luft-/Kraftstoffverhältnis ist in beiden Zonen während des Verbrennungsprozesses gleich (ottomotorische homogene Verbrennung)
- Stickoxidbildung findet nur in der verbrannten Zone statt

Aus den vorangegangenen Vereinbarungen ergeben sich für die thermischen Zustandsgleichungen der beiden Zonen folgende Terme:

$$p_{Zyl}(\varphi)V_{VZ}(\varphi) = m_{VZ}(\varphi)R_{VZ}(\varphi)T_{VZ}(\varphi) \quad (4.41)$$

$$p_{Zyl}(\varphi)V_{UZ}(\varphi) = m_{UZ}(\varphi)R_{UZ}(\varphi)T_{UZ}(\varphi) \quad (4.42)$$

4.2.2. Temperaturverlauf der verbrannten Zone

Das kennzeichnende Merkmal des Zwei-Zonen Modells besteht in dem Temperaturunterschied beider Zonen. Es ist im Laufe der Verbrennung davon auszugehen, dass das verbrannte Gas Wärme an das unverbrannte Gemisch abgibt. Dieser Vorgang ist in geeigneter Weise im Zwei-Zonenmodell abzubilden.

In [Gär01] existiert eine ausführliche Recherche der einzelnen Modellannahmen. Im Wesentlichen gleichen sich die Modellannahmen dahingehend, dass am Beginn der Verbrennung die „Verbrannte Zone“ als adiabat betrachtet wird und die Temperaturen der beiden Zonen sich im Laufe der Verbrennung angleichen.

Für die Simulation der Verbrennung in dieser Arbeit wurde der Ansatz aus [Gär01] herangezogen, der eine Erweiterung des Ansatzes nach [Hei96] darstellt. Dieser Ansatz stellt einen rein empirischen Zusammenhang zwischen der Temperaturdifferenz der verbrannten und unverbrannten Zone her.

$$T_{VZ}(\varphi) - T_{UZ}(\varphi) = B(\varphi) * T_{adiabat} \quad (4.43)$$

$B(\varphi)$ stellt in Gleichung (4.43) die kurbelwinkelabhängige normierte Formfunktion dar. Diese muss für den betreffenden Betriebspunkt noch mit der

betriebspunktabhängigen adiabaten Flammentemperatur $T_{adiabat}$ multipliziert werden. Damit ergibt sich der Verlauf der Temperaturerhöhung. Die Berechnung dieser Größe wird später noch folgen. Der Betrag der Druckerhöhung $\Delta p(\varphi) = (p_{zyl}(\varphi) - p_{schlepp}(\varphi))$, verursacht durch die Verbrennung, gibt das Ausmaß an Turbulenz während der Reaktion wieder und geht auf Arbeiten von [Wos70] zurück.

$$B(\varphi) = \frac{K - \int_{\varphi_{VB}}^{\varphi} \Delta p(\varphi) m_{VZ}(\varphi) d(\varphi)}{K} \quad (4.44)$$

Die Berechnung des Terms aus Druckdifferenz und Masse in Gleichung (4.44) würde durch den Massenumsatz während der Verbrennung ansteigen. Daher wird das Integral K dieses Terms eingeführt, mit dem die Funktion normiert und umgekehrt wird. Damit ergibt sich für $B(\varphi)$ eine Formfunktion, die zwischen 1 und 0 verläuft.

$$K = \int_{\varphi_{VB}}^{\varphi_{AÖ}} \Delta p(\varphi) m_{VZ}(\varphi) d(\varphi) \quad (4.45)$$

$T_{adiabat}$:Adiabate Verbrennungstemperatur	[K]
$\Delta p(\varphi)$:Differenzdruck $p_{zyl}(\varphi) - p_{schlepp}(\varphi)$	[bar]
$p_{zyl}(\varphi)$:Zylinderdruck	[bar]
$p_{schlepp}(\varphi)$:theoretischer Zylinderdruck (ohne Verbrennung)	[bar]
$m_{VZ}(\varphi)$:Masse in der verbrannten Zone	[K]
AÖ	:Auslass öffnet	[°KW]
VB	:Verbrennungsbeginn	[°KW]

Zur Berechnung der Funktion $B(\varphi)$ kann sowohl ein realer Druckverlauf wie auch ein synthetischer Druckverlauf eingesetzt werden. Es gilt jedoch zu beachten, dass bei der Verwendung eines synthetischen Druckverlaufs die Wandwärmeverluste, Leckagen und sonstigen Einflüsse berücksichtigt werden, um die Vergleichbarkeit mit dem realen Zylinderdruckverlauf zu wahren.

Ein Anpassen des Faktors A^* , wie dies z.B. in den Arbeiten [Web01] und [Hei96] beschrieben ist, kann unterbleiben, da für jeden Betriebspunkt vorher die adiabate Flammentemperatur $T_{adiabat}$ errechnet wird.

Die Ermittlung der umgesetzten Masse $m_{VZ}(\varphi)$ erfolgt gemäß dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik, welcher in vollständiger Form in [PKS02] oder [MSSO04] gegeben ist. Vernachlässigt man für die Betrachtungen

- kinetische Energie
- Leckage
- Kraftstoffverdunstung,

so kommt man zu dem Brennverlauf in differentieller Form

$$\frac{dQ_{Br}}{d\varphi} = \frac{dU}{d\varphi} + p_{zyl} \frac{dV_{zyl}}{d\varphi} + \frac{dQ_W}{d\varphi} \quad (4.46)$$

Die Integration über die Brenndauer sowie die Berücksichtigung des unteren Heizwertes H_u von Kraftstoff liefert die Kraftstoffmasse m_{Br} :

$$m_{Br} = \frac{1}{H_u} \int_{BB}^{BE} \frac{dQ_{Br}}{d\varphi} d\varphi \quad (4.47)$$

damit ergibt sich für die Gesamtmasse der verbrannten Zone

$$m_{VZ}(\varphi) = m_{Br}(\varphi)(1 + \lambda m_{Lmin}) + m_{RG} \quad (4.48)$$

$m_{VZ}(\varphi)$:Masse - verbrannte Zone	[kg]
$m_{Br}(\varphi)$:Kraftstoffmasse	[kg]
λ	:globales Luft-/Kraftstoffverhältnis	[-]
m_{Lmin}	:minimaler Luftbedarf	[-]
m_{RG}	:Restgasmasse	[kg]

4.2.3. Adiabate Verbrennungstemperatur

Im vorangegangenen Abschnitt wurde zur Berechnung der verbrannten Zone die adiabate Flammentemperatur bzw Verbrennungstemperatur herangezogen.

Die adiabate Verbrennungstemperatur stellt die Temperatur der Reaktionszone dar, die folgenden idealisierten Vorstellungen des Verbrennungsablaufs genügt:

- isobar
- adiabat
- keine Dissoziation

Der Grund für diese mögliche Idealisierung liegt darin, dass die Verbrennung zu Beginn ohne jede Durchmischung mit der Umgebung und ohne jeden Wandkontakt nahezu adiabat verläuft.

Für diesen kurzen Zeitpunkt ist auch die Annahme einer isobaren Reaktion gerechtfertigt. Im weiteren Verlauf nähert sich die Verbrennungstemperatur durch Wärmeübergang und Vermischung immer weiter der mittleren Brennraumtemperatur an.

Die Verbrennungstemperatur lässt sich aus einer Enthalpiebilanz der Reaktanten der unverbrannten Zone und den Produkten der verbrannten Zone ermitteln. Daher sind Temperatur und Zusammensetzung der unverbrannten Zone entscheidend für die Höhe der Verbrennungstemperatur. Die Herleitung der Flammen- bzw Verbrennungstemperatur ist in [SHK07] und [WMD01] ausführlich dargestellt.

Ein praktikabler Weg, diese innerhalb eines Rechnerprogramms in Kombination mit einer Gleichgewichtsrechnung iterativ zu ermitteln ist, in [WMD01] ebenfalls dargestellt.

4.2.4. Restgasgehalt

Der Restgasanteil spielt eine entscheidende Rolle bei der Stickoxidbildung wie aus Abbildung 4.13 hervorgeht. Hier ist, ausgehen von einem Referenzpunkt des realen Motorbetriebes, die Stickoxidemission über dem

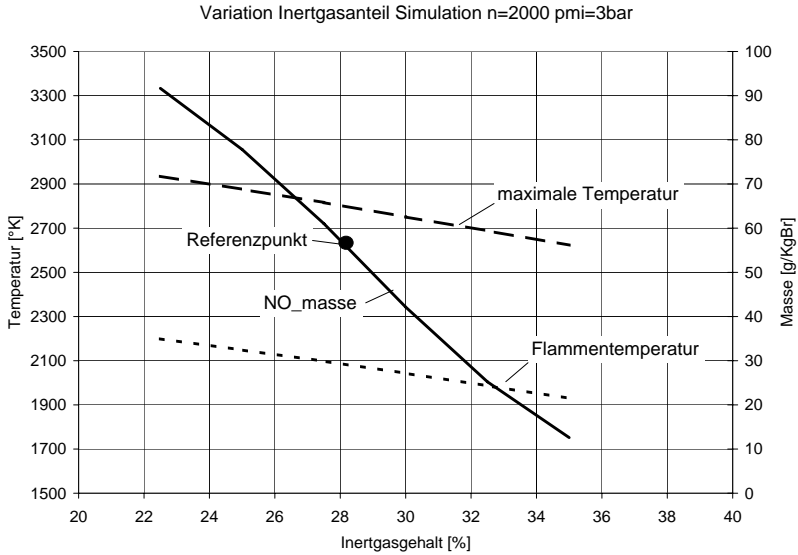


Abbildung 4.13.: Restgasabhängigkeit der thermischen Stickstoffmonoxidbildung (Simulation)

Restgasgehalt dargestellt. Außerdem sind die Flammentemperatur sowie die maximale Temperatur in der verbrannten Zone dargestellt. Diese Simulationsergebnisse zeigen die Notwendigkeit, den Restgasgehalt zu kennen.

Da der Restgasgehalt experimentell nur mit großem Aufwand bestimmt werden kann, wurde das bestehende Restgasmodell aus [KBSS02] eingesetzt. Dieses modelliert mit Hilfe folgender Eingangsgrößen den Restgasgehalt einer Verbrennungskraftmaschine:

- mittlerer Abgasdruck p_{ABG}
- mittlerer Saugrohrdruck p_{ANS}
- Ventilquerschnitt Einlass, bezogen auf Kolbenfläche α_{KE}

- Ventilquerschnitt Auslass, bezogen auf Kolbenfläche α_{KA}
- kurbelwinkelabhängiges Volumen $V(\varphi)$

Zur Errechnung des Restgasmodells wurden die notwendigen Durchflusskoeffizienten auf einem am Fachgebiet vorhandenen stationären Strömungsprüfstand ermittelt. Hierbei wurde darauf geachtet, dass die Durchflussrichtung der erwarteten Strömungsrichtung des Gases entsprach. Die kurbelwinkelabhängige Ventilerhebungskurve wurde inkrementell mittels einer Mesuhr bestimmt. Der Saugrohr- sowie Abgasdruck wurden im Rahmen einer Serienkennfeldvermessung des Versuchsträgers ermittelt.

Die Berechnung der gesamten Restgasmasse m_{Rest} wird von den Autoren in drei Abschnitte gegliedert:

$$m_{rest} = m_{Rest0} + \Delta m_{RestV} + \Delta m_{RestB} \quad (4.49)$$

m_{Rest0}	:im Zylinder eingeschlossene Restgasmasse bei EÖ
m_{RestV}	:durch Volumenänderung veränderte Restgasmasse
m_{RestB}	:durch Druckdifferenz veränderte Restgasmasse

Der Anteil m_{Rest0} stellt die im Zylinder eingeschlossene Restgasmasse in der Position Einlass öffnet dar. Diese Position bildet den Beginn der Ventilüberschneidungsphase. Gleichung (4.51) mit m_{RestV} gibt die Massenänderung an, die die Volumenänderung der Kolbenbewegung hervorruft. Der Term (4.52) mit m_{RestB} gibt an, wie groß die Massenänderung, bedingt durch die treibende Druckdifferenz zwischen Abgas- und Saugrohrdruck, ist.

$$m_{Rest0} = \rho_{Abgas} V_Z(\varphi) \quad (4.50)$$

$$m_{RestV} = \rho \sum_{\varphi=\varphi_{EV\ddot{O}}}^{\varphi_{AVS}} \left[\frac{dV}{d\varphi} \frac{\alpha_{KA}^2}{\alpha_{KA}^2 + \alpha_{KE}^2} \Delta\varphi \right] \quad (4.51)$$

$$m_{RestB} = \text{sign}(p_{ABG} - p_{ANS}) A_K \sqrt{2 \rho |p_{ABG} - p_{ANS}|}$$

$$\frac{dt}{d\varphi} \sum_{\varphi=\varphi_{EV\ddot{O}}}^{\varphi_{AVS}} \left[\frac{dV}{d\varphi} \frac{\alpha_{KA} \alpha_{KE}}{\sqrt{\alpha_{KA}^2 + \alpha_{KE}^2}} \Delta\varphi \right] \quad (4.52)$$

In Abbildung 4.14 ist das Ergebnis der Berechnung in einem Kennfeld in Abhängigkeit von indiziertem Mitteldruck und Drehzahl aufgetragen. Es wird deutlich, dass der Restgasgehalt hin zu niedrigen Lasten und Drehzahlen zunimmt und umgekehrt im Bereich der Nennleistung am geringsten ist. Das Restgasmodell dient als Grundlage für das folgende thermochemische Modell sowie als Eingangsparameter für das ebenfalls folgende empirische Modell. Die im Restgasmodell bestimmten Werte werden zusammen mit der rückgeführten Abgasmenge zu einer Inertgasmenge aufsummiert.

$$m_{Inertgas} = m_{rest} + m_{AGR} \quad (4.53)$$

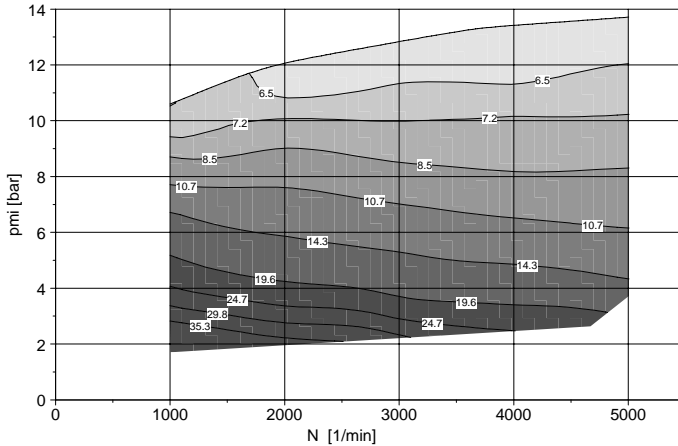


Abbildung 4.14.: Restgasmodell für den Versuchsträger - Angaben in % der Zylinderladungsmasse

5. Das empirische Stickoxidmodell

5.1. Gestaltung des Modells

Das empirische Stickoxidmodell wird in Anlehnung an die Arbeit von Gärtner [Gär01] angefertigt, welche 2001 ebenfalls am Fachgebiet Verbrennungskraftmaschinen der TU Darmstadt fertiggestellt wurde. Bei dem empirischen Stickoxidmodell nach Gärtner wird mittels Polynommodell das Emissionsverhalten von NFZ-Dieselmotoren abgebildet. Diese Arbeit hat zum Ziel, einen Beitrag zur Modellierung der ottomotorischen Stickoxidemissionen zu leisten.

Das erstellte polynomiale Modell nach Gärtner verwendet folgende Eingagsparameter bzw. Regressoren:

- Verbrennungsschwerpunkt
- Ladungsmasse im Zylinder, bezogen auf das Hubvolumen
- Brennstoffmasse im Zylinder, bezogen auf das Hubvolumen
- Sauerstoffmasse im Zylinder, bezogen auf das Hubvolumen

Diese Größen bilden in geeigneter Weise das Emissionsverhalten eines NFZ-Dieselmotors ab und haben eine Allgemeingültigkeit für NFZ-Dieselmotoren. Die Auswahl der Parameter leitet sich aus den Erkenntnissen ab, die aus den reaktionskinetischen Betrachtungen gewonnen wurden.

Im Gegensatz zu [Gär01] wurde in dieser Arbeit zur Ermittlung der Abhängigkeiten zwischen ottomotorischer Verbrennung und Stickoxidemission eine verkürzte Kreisprozessrechnung mit Hilfe des Vibe Ersatzbrennverlaufes herangezogen. Dieser ermöglicht das individuelle Variieren einzelner

motorischer Parameter und die Ermittlung der Einzeleffekte auf die Stickoxidemissionen.

5.2. Einflussgrößen und Modellparameter

Im nächsten Schritt sollen die Einflüsse der unterschiedlichen Gaszustände in einer Hubkolbenmaschine auf die Stickoxidbildung genauer betrachtet und die wesentlichen Einflussgrößen auf ein empirisches Modell erarbeitet werden. Wichtig ist dabei, dass die Modellparameter universell auf Ottomotoren anwendbar sein müssen.

Hierzu werden Variationen der Verbrennung sowohl mit der reaktionskinetischen Simulation als auch experimentell vorgenommen und gegenübergestellt. Die Simulation dient dem Verständnis über die Entstehung der Stickoxidemissionen in Abhängigkeit von den Einflussgrößen. Sie erhebt aber keinen Anspruch auf eine reale Wiedergabe der absoluten motorischen Stickoxidemissionen, da die Parametervariation isolierte Veränderungen abseits des realen Motorbetriebes darstellt. Zum besseren Verständnis der Übertragbarkeit werden experimentelle Daten zum Vergleich herangezogen und die Ergebnisse gegenübergestellt.

- Luft-/Kraftstoffverhältnis (Λ)
- Inertgasgehalt
- Frischladungsmasse
- Drehzahl
- Verbrennungsschwerpunkt
- Brenndauer
- Wassergehalt
- Ladungstemperatur

Es kann z.B. nur auf Umwegen der Inertgasgehalt verändert werden, ohne dabei die Brenndauer zu verändern. Daher wurde für diese Untersuchung der Weg gewählt, die motorische Verbrennung über einen Vibe Ersatzbrennverlauf abzubilden. Der Ersatzbrennverlauf nach [Vib70] bietet mit einfachen Mitteln die Möglichkeit, einen Brenn- oder Heizverlauf für einen Verbrennungsmotor realitätsnah nachzubilden und ihn hinsichtlich Form, Brenndauer, Schwerpunkt und Energieintegral frei zu variieren.

Hierbei wird der Vibe Ersatzbrennverlauf nach [Vib70] wie folgt definiert:

$$\frac{dQ_B}{d\varphi} = Q_{B,ges} a(m+1) \left(\frac{\varphi - \varphi_{BB}}{\Delta\varphi_{BD}} \right)^m e^{-a \left(\frac{\varphi - \varphi_{BB}}{\Delta\varphi_{BD}} \right)^{(m+1)}} \quad (5.1)$$

mit

BD	:Brenndauer	[°KW]
BB	:Brennbeginn	[°KW]
$Q_{B,ges}$:zugeführte Gesamtenergiemenge	[J]
m	:Formparameter	[-]
a	:Parameter	[-]

Zunächst gilt es, den Ersatzbrennverlauf derart abzubilden, dass der indizierte Referenzbrennverlauf gut wiedergegeben wird. Als Referenz für die thermochemische Berechnung wird der Teillastpunkt herangezogen, wie er in Abbildung 5.1 dargestellt ist.

Vom Druckverlauf wird der Brennverlauf unter Vernachlässigung der Leckage berechnet. Zur Berücksichtigung der Wandwärmeverluste wurde der Ansatz nach Bargende [Bar91] vgl. Kapitel 3.1.4 herangezogen. Ausgehend von diesem approximierten Ersatzbrennverlauf werden im folgenden Kapitel sämtliche Variationsrechnungen vorgenommen. Der Ersatzbrennverlauf entspricht folgendem Betriebspunkt:

- $n=2000min^{-1}$
- $p_{mi}=3bar$

- Inertgasanteil=28.5%
- Verbrennungsschwerpunkt= 6 °KWnZOT
- Lambda=1

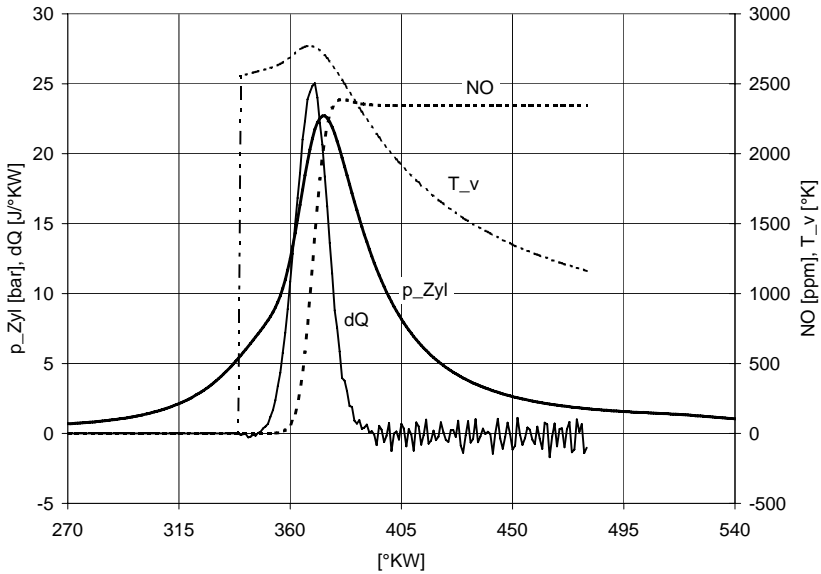


Abbildung 5.1.: Referenzbetriebspunkt für die thermochemischen Berechnungen $n = 2000$, $p_{mi} = 3\text{bar}$

In Abbildung 5.2 ist der gewählte Vibebrennverlauf im Vergleich zu dem Referenzbetriebspunkt aus Abbildung 5.1 dargestellt. Sowohl der Brennbeginn, das Brennende wie auch das Maximum der Energiefreisetzung stimmen sehr gut überein, ebenso die aus der Reaktionskinetik gerechneten Stickoxidverläufe. Damit wird der Vibebrennverlauf mit der Parametrierung:

- Brennbeginn=346°KW
- Brenndauer=60°KW

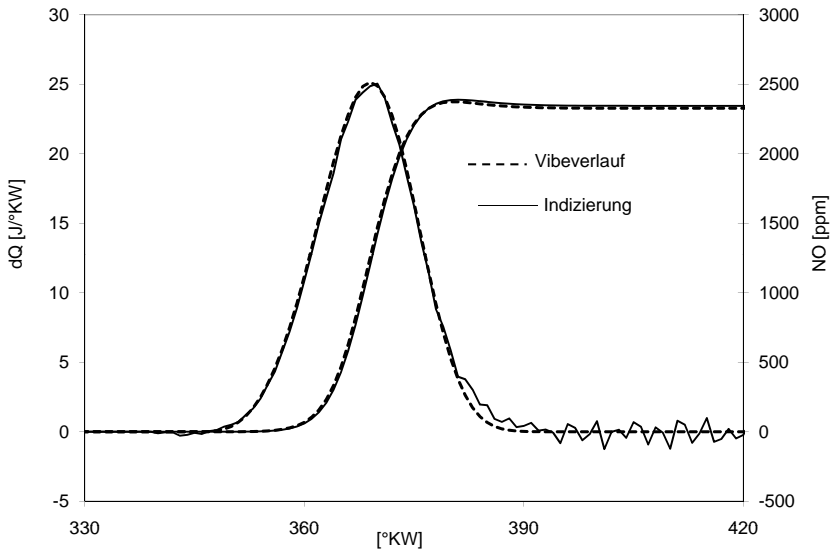


Abbildung 5.2.: Vibe- und Indizierungsverläufe im Vergleich zum Referenzbrennverlauf für die thermochemischen Berechnungen

- $Q=418$
- $m=3$
- $a=6,905$

für alle weiteren Untersuchungen als Referenzbrennverlauf herangezogen. Mit Hilfe des synthetischen Vibe- und Indizierungsverlaufes wird es nun möglich sein, die wichtigsten Einflussgrößen der Stickoxidentstehung im ottomotorischen Betrieb zu isolieren und deren Einfluss darzustellen. Von den üblichen Größen, die von Brennverläufen aus Messdaten bekannt sind, sollen die dargestellten 60°KW nicht zu Irritationen führen. Die übliche Definition zwischen 10 und 90% der Energieumsetzung würde auch hier zu einer Größenordnung von 30°KW führen. Die 60° KW Brenndauer ergeben

sich hier aus dem absoluten Anfangs- und Endpunkt des Brennverlaufes.

Bei den nun folgenden Berechnungen wird jeweils ein Parameter variiert, während die übrigen konstant gehalten werden. Die einzige Ausnahme bildet die Ermittlung der adiabaten Flammentemperatur. Diese wird bei sämtlichen Variationsrechnungen neu gebildet. Die Abweichung von der Regel, alle Variationsparameter konstant zu halten, ist notwendig. Eine gleichbleibende Flammentemperatur würde den Gegebenheiten zum Enflammungszeitpunkt sonst nicht Rechnung tragen (vgl. Kapitel 4.2.3).

Die Variationsrechnungen werden der besseren Vergleichbarkeit wegen alle im selben Diagramm Layout dargestellt. Die gemeinsame Abszisse entspricht °KW. Auf der Ordinate sind jeweils folgende Werte dargestellt.

- thermisches Stickstoffmonoxid der Rauchgaszone $\text{NO}(\alpha)$ [ppm]
- die Temperatur der der Rauchgas- bzw verbrannten Zone $T_v(\alpha)$ [°K]
- der resultierende Zylinderdruckverlauf $P_{\text{ZYL}}(\alpha)$ [Pa]
- der Vibe Verlauf als Eingangsgröße $dQ(\alpha)$ [J]

5.2.1. Verbrennungsschwerpunkt und Brenndauer

In Abbildung 5.3 ist die Variation des Verbrennungsschwerpunktes im Bereich von 20°KW um den Optimalpunkt von 6°KWnZOT dargestellt. Alle übrigen Parameter wie Kraftstoffmenge, Brenndauer, Restgasmasse, Kraftstoff-/ Luftverhältnis und Drehzahl bleiben für die Simulationsrechnung konstant. Für den betrachteten Verstellbereich ergibt sich eine Änderung der Stickstoffmonoxidkonzentration von 1750ppm.

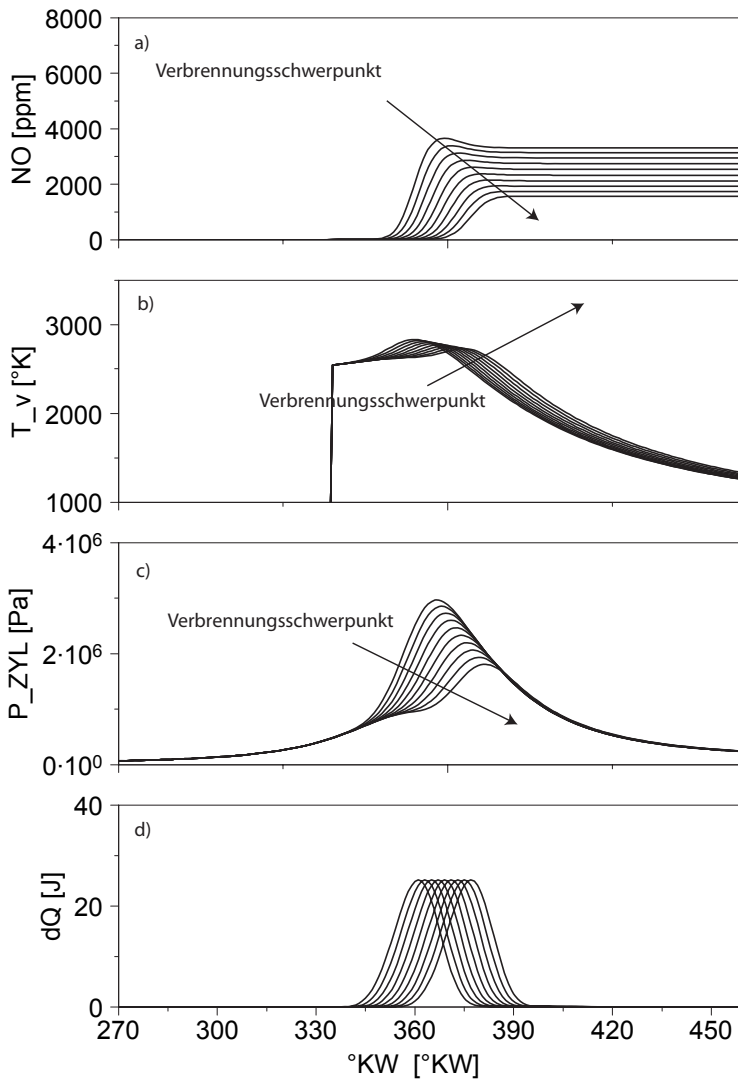


Abbildung 5.3.: Variation des Verbrennungsschwerpunktes - Simulation

Im realen Motorbetrieb wird die Variation des Verbrennungsschwerpunktes durch die Variation des Zündzeitpunktes erreicht.

In Abbildung 5.3b ist die Temperatur der Rauchgaszone als Kurvenschar in Abhängigkeit des Verbrennungsschwerpunktes aufgetragen. In Abbildung b) ist der Spitzentemperaturabfall zu erkennen, der sich aufgrund der Schwerpunktverschiebung in Richtung spät ergibt.

Mit zunehmend kälterer Verbrennung wird der Anteil an zurückgebildetem NO in der Expansionsphase geringer. Die Rückbildung friert unterhalb einer Temperatur von 2350°K weitgehend ein. Nach Erreichen des Verbrennungsschwerpunktes ist die Bildung von NO zum überwiegenden Teil abgeschlossen. Dies deckt sich auch mit den Erkenntnissen aus [Gär01].

Aus dem vorangegangenen Kapitel 4.1 ergibt sich, dass die Stickstoffmonoxidbildung erst ab einer Temperatur von unter 2000°K zum Erliegen kommt. Die Reaktionsgeschwindigkeiten der Rückbildung sind bei Temperaturen zwischen 2000°K und 2300°K jedoch zu klein, um innerhalb der Zeitmassstäbe einer Verbrennungskraftmaschine zu erkennbaren Veränderungen der Stickoxidkonzentrationen zu führen (vgl. Abbildung 4.8).

Der Variation des Verbrennungsschwerpunktes kommt bei der ottomotorischen Verbrennung aufgrund der Schwankungen noch eine zusätzliche Bedeutung zu. Gemischinhomogenitäten führen zu Schwankungen in der Flammenausbreitung, den sogenannten ottomotorischen Schwankungen [MSSO04]. Dies führt zu einem oszillierenden Verhalten im Mitteldruck sowie des Verbrennungsschwerpunktes wie dies in Abbildung 5.4 dargestellt ist.

In Abbildung 5.4 sind ca. 100 aufeinanderfolgende Zyklen eines Teillastbetriebspunktes dargestellt. Deutlich zu erkennen ist, dass sich die einzelnen Verbrennungen in Brenndauer und Verbrennungsschwerpunkt unterscheiden. Wie sich aus Abbildung 5.3 ergibt, entstehen durch die Änderung des Verbrennungsschwerpunktes von Zyklus zu Zyklus Unterschiede in der Stickoxidkonzentration.

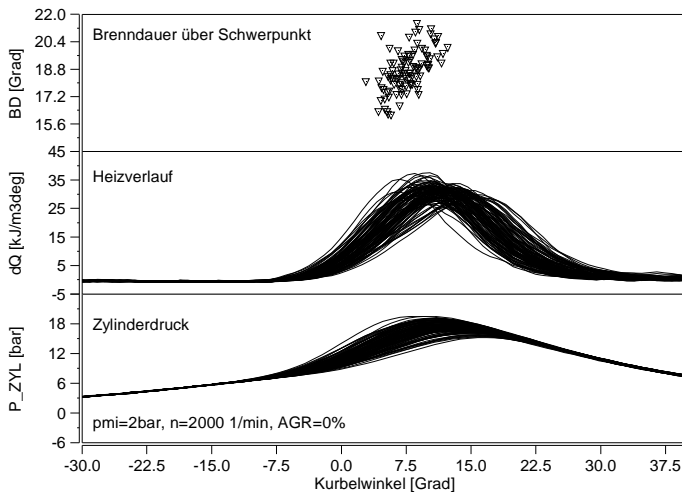


Abbildung 5.4.: ottomotorische Schwankungen - Druckverläufe - Heizverläufe - Verbrennungsschwerpunkte über Mitteldruck

Im Vergleich zur Simulation sind die realen Schwerpunktschwankungen in Abbildung 5.4 durch eine zusätzliche Veränderung der Brenndauer gekennzeichnet. Diese verändert sich aufgrund der unterschiedlichen Inertgas- und Kraftstoffverteilung sowie der unterschiedlichen Flammenwege und Zylinderinnenströmung des sich ändernden Zylindervolumens.

Eine genaue Erfassung der Zusammenhänge ist hier besonders wichtig, da eine vollständige Zyklusauflösung der Abgasmessung bei jeder Drehzahl aufgrund von Vermischungsvorgängen in der Messgasleitung sowie der Messkammer nicht gewährleistet ist (vgl. Kapitel 3.1.1).

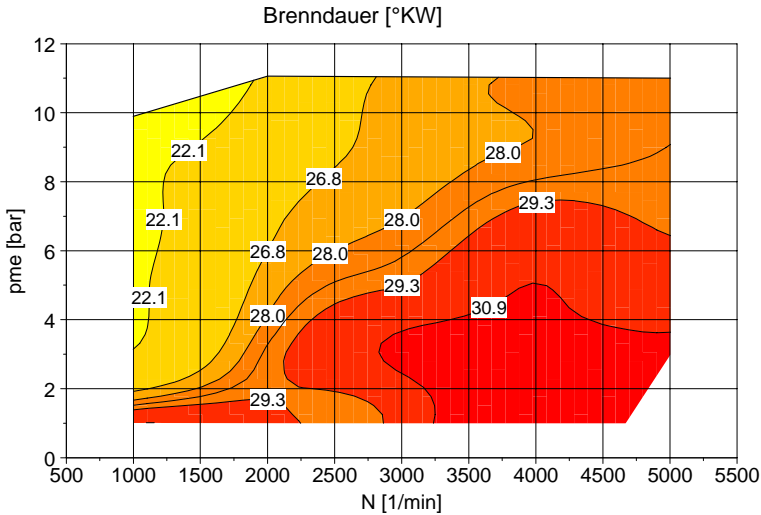


Abbildung 5.5.: Brenndauer des Versuchsträger - Serie

In Abbildung 5.6 ist die Stickoxidbildung für die Variation der Brenndauer im Bereich von 10°KW dargestellt.

Der Variationsbereich der Simulation wurde anhand von Abbildung 5.5 gewählt. Aus diesem Diagramm wird die Brenndauer für den Serienbetrieb des Versuchsträgers ersichtlich. Die Brenndauer schwankt im dargestellten Bereich nicht mehr als 10°KW .

Die Variation in Abbildung 5.6 dient dazu, den Einfluss der Brenndauer auf die Stickoxidentstehung aufzuzeigen. In dem betrachteten Variationsbereich ändert sich die NO Konzentration um 250 ppm. Die Variation der Brenndauer hat damit auf die Bildung von thermischem Stickstoffmonoxid einen geringeren Einfluss als der Verbrennungsschwerpunkt. Setzt man den Verbrennungsschwerpunkt als konstant voraus, so führt eine Variation der Brenndauer bei ansonsten gleichem Energieinhalt zu einer Verformung des Brennverlaufs. Anfangs- und Endpunkt sowie das Maximum werden

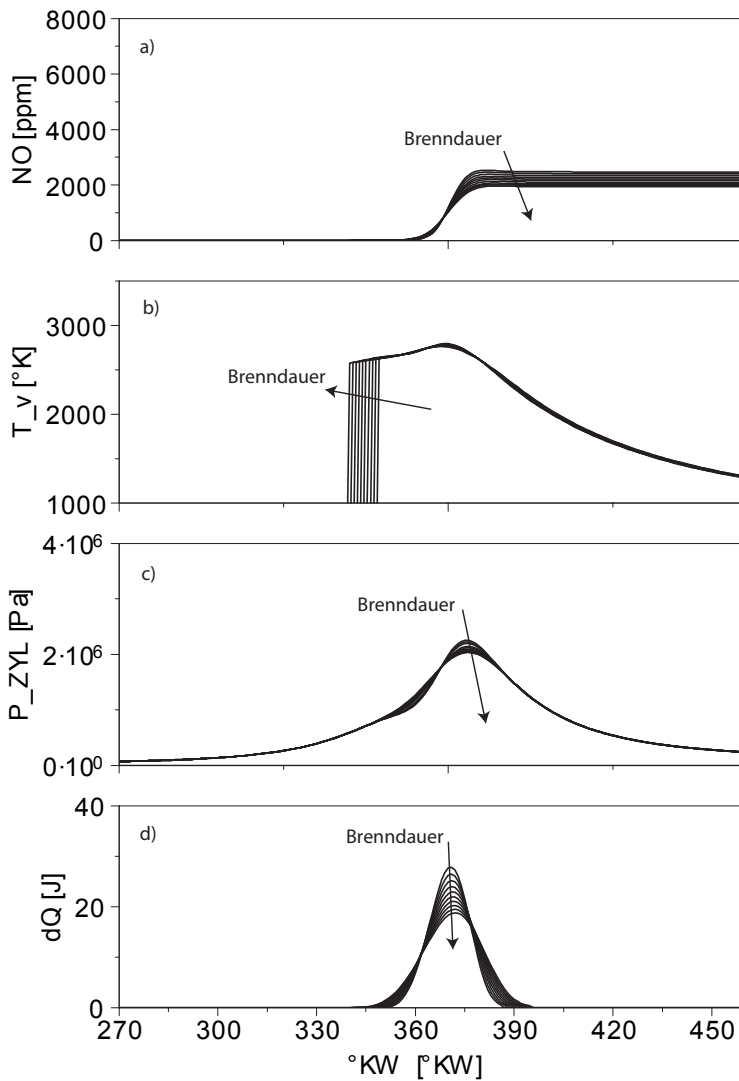


Abbildung 5.6.: Variation der Brenndauer

hierbei verändert. Dies führt zu einer zeitlich unterschiedlichen Energiefreisetzung und damit zu einem unterschiedlichen Temperaturniveau. Dieser Zusammenhang wiederum erklärt den Einfluss auf die Stickoxidentstehung.

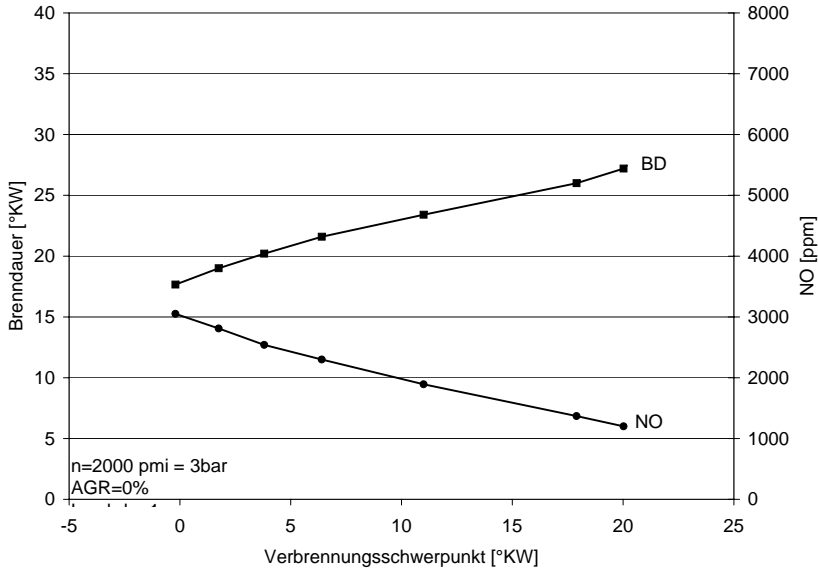


Abbildung 5.7.: Brenndauer über Schwerpunkt - Reale Verbrennung

Betrachtet man nun die Ergebnisse der realen Variation des Verbrennungsschwerpunktes und die damit verbundene Änderung der Brenndauer, so wird ersichtlich, dass die Änderung von nur 1850 ppm Stickstoffmonoxid die Summe der Änderung aus Verbrennungsschwerpunkt und Brenndauer ergibt.

Bei der Berechnung der Brenndauer aus gemessenen Zylinderdruckverläufen, wurde die Winkeldifferenz zwischen dem 10% und dem 90% Energieumsatzpunkt herangezogen.

Nimmt man die bisherigen Ergebnisse von Schwerpunktvariation und

Brenndauervariation zusammen, erhält man eine Gesamtänderung von 2000ppm. Es ergibt sich eine Lücke von 150ppm. Alle Effekte sind daher noch nicht ausreichend abgebildet.

Die reale Schwerpunktvariation besitzt einen versteckten Lasteinfluss. Eine Verschiebung des Schwerpunktes ändert den Wirkungsgrad der Energieumsetzung [Hoh07b]. Daher ändern sich Frischladungsmasse sowie Inertgasanteil, um den geforderten indizierten Mitteldruck von 3 bar aufrecht zu erhalten. Später wird noch gezeigt, weshalb eine Änderung der Frischladungsmasse die Stickoxidentstehung beeinflusst.

Der Schwerpunkt wird in jedem Fall als Eingangsparameter für das NO herangezogen. Dies ergibt sich schon aus den Erkenntnissen anderer Arbeiten. Die Signifikanz der winkelbezogenen Brenndauer muss bei der Erstellung des empirischen Stickoxidmodells überprüft werden.

5.2.2. Drehzahl

Die Variation der Drehzahl stellt im eigentlichen Sinne ebenfalls eine Änderung der Brenndauer dar. Im Unterschied zu der Brenndauervariation im vorhergehenden Unterkapitel weicht die idealisierte Variation der Drehzahl bzw der Brenndauer in zwei Punkten ab:

- die Form des Brennverlaufes ändert sich nicht in Abhängigkeit des Kurbelwinkels
- der Zeitmaßstab der Änderung ist sehr viel größer

In Abbildung 5.8 ist der Einfluss der Drehzahl auf die Stickoxidentstehung dargestellt. Sowohl der Brennverlauf wie auch Druck und Temperatur bleiben bei dieser idealisierten Betrachtung gleich. Die Stickoxidkonzentration fällt bei zunehmender Drehzahl innerhalb des Variationsintervalls um 1500ppm. Diese Betrachtung erscheint schlüssig, wenn man sich die Ergebnisse aus Kapitel 4 vor Augen führt. Die Zeit, die zur Bildung von NO zur Verfügung steht, wird mit steigender Drehzahl geringer. Eine Rückbildung des NO ist bei hohen Drehzahlen nicht mehr zu beobachten.

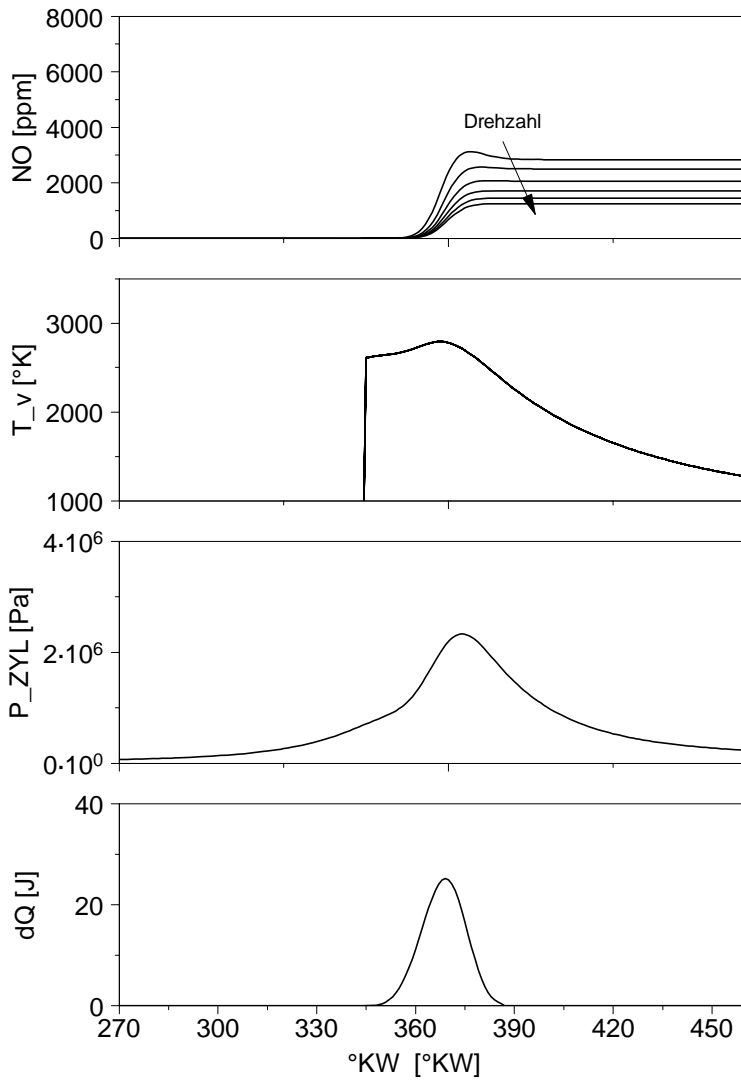


Abbildung 5.8.: Variation der Drehzahl

5. Das empirische Stickoxidmodell

Eine sinkende NO Emission bei steigender Drehzahl und konstantem Mitteldruck ist beim Versuchsträger nicht zu beobachten. In Abbildung 5.9 ist die Stickoxidkonzentration in der Teillast des Versuchsträgers dargestellt. Im Gegensatz zur Simulation steigt die Stickoxidkonzentration bei konstanter Last über der Drehzahl an.

Das im ersten Augenblick widersprüchliche Ergebnis erklärt sich jedoch aus dem Restgaskennfeld des Motors, welches in Abbildung 4.14 dargestellt ist. Der über der Drehzahl sinkende Restgasanteil begünstigt die Stickoxidbildung. Auf den Einfluss von Inertgas im Allgemeinen wird später noch eingegangen.

Die Einführung der Drehzahl bzw. der zeitbezogenen Brenndauer wird als Modellparameter berücksichtigt.

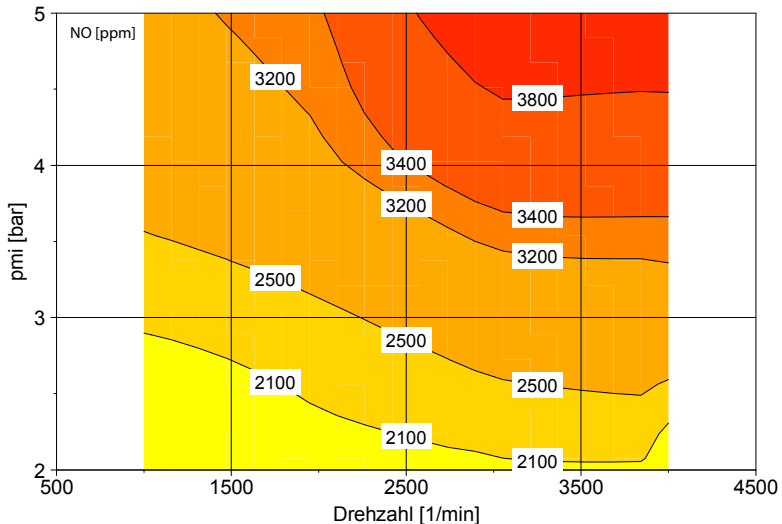


Abbildung 5.9.: Auszug der Stickoxidkonzentration des Versuchsträgers

5.2.3. Lambdavariation

Die Änderung des Luft-/Kraftstoffverhältnisses ist in den Abbildungen 5.10 und 5.11 dargestellt. Der besseren Übersichtlichkeit wegen wurden die Diagramme geteilt.

Die Theorie zu dem Einfluss des Luft-/Kraftstoffverhältnisses wurde bereits in Kapitel 4.1 erarbeitet und in Abbildung 4.10 dargestellt. Mit steigendem Lambda nimmt das Angebot an freiem molekularen und atomaren Sauerstoff zu. Bei konstanter Temperatur würde dies zu einer Erhöhung der Stickoxidkonzentration führen.

Die in Abbildung 5.11 dargestellte Parametervariation setzt eine konstante Brennstoffmasse voraus. Daher sinkt der Gemischheizwert (vgl. [PKS02]) und damit die Verbrennungstemperatur ab, wenn die Luftmasse erhöht wird. Die gleiche Menge an Kraftstoff muss bei magererer Verbrennung eine größere Menge an Luft erhitzen. Die sinkende Temperatur überkompensiert daher den Effekt, den der freie Sauerstoff auf die Stickoxidbildung hat.

Die fette Verbrennung, die in Abbildung 5.10 dargestellt ist, kann ebenfalls mit den Erkenntnissen aus Kapitel 4.1 einfach erklärt werden. Im Falle von $\lambda < 1$ sinken sowohl Verbrennungstemperatur wie auch freier Sauerstoff. Damit sinkt die Stickoxidentstehung bei fetterem Gemisch.

Das Luft-/Kraftstoffgemisch hat einen großen Einfluss auf die Stickoxidentstehung und wird daher als Eingangsgröße für das empirische Modell herangezogen.

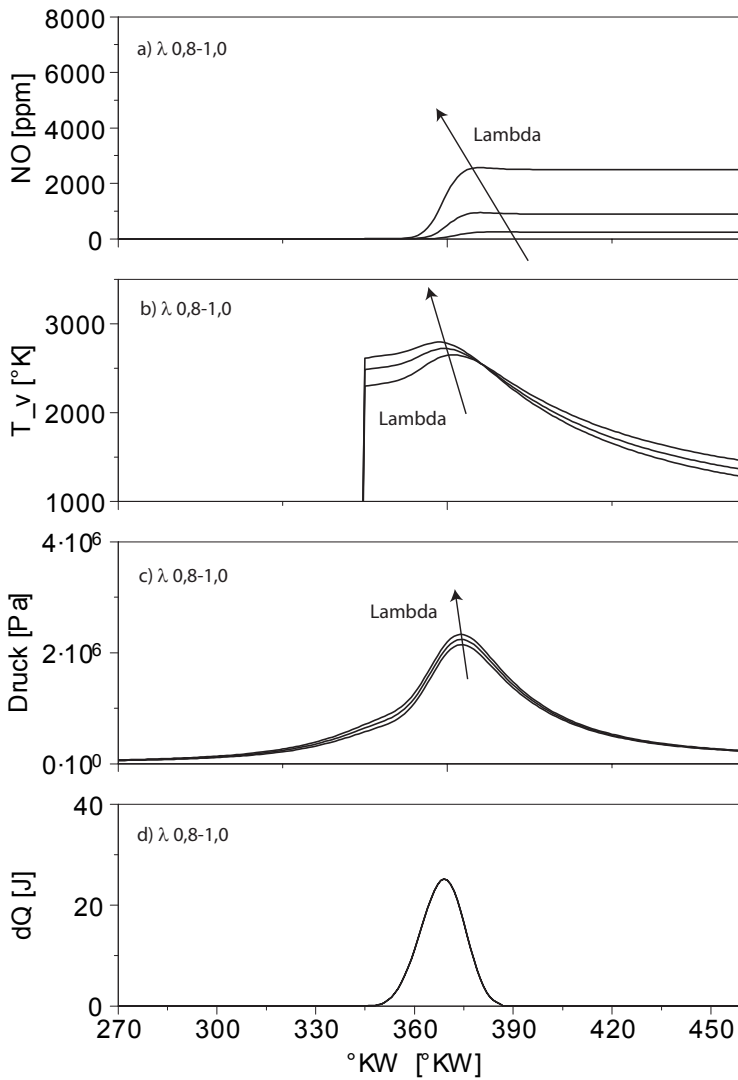


Abbildung 5.10.: Variation des Luft- Kraftstoffverhältnisses im Bereich von $\lambda = 0,8 - 1,0$

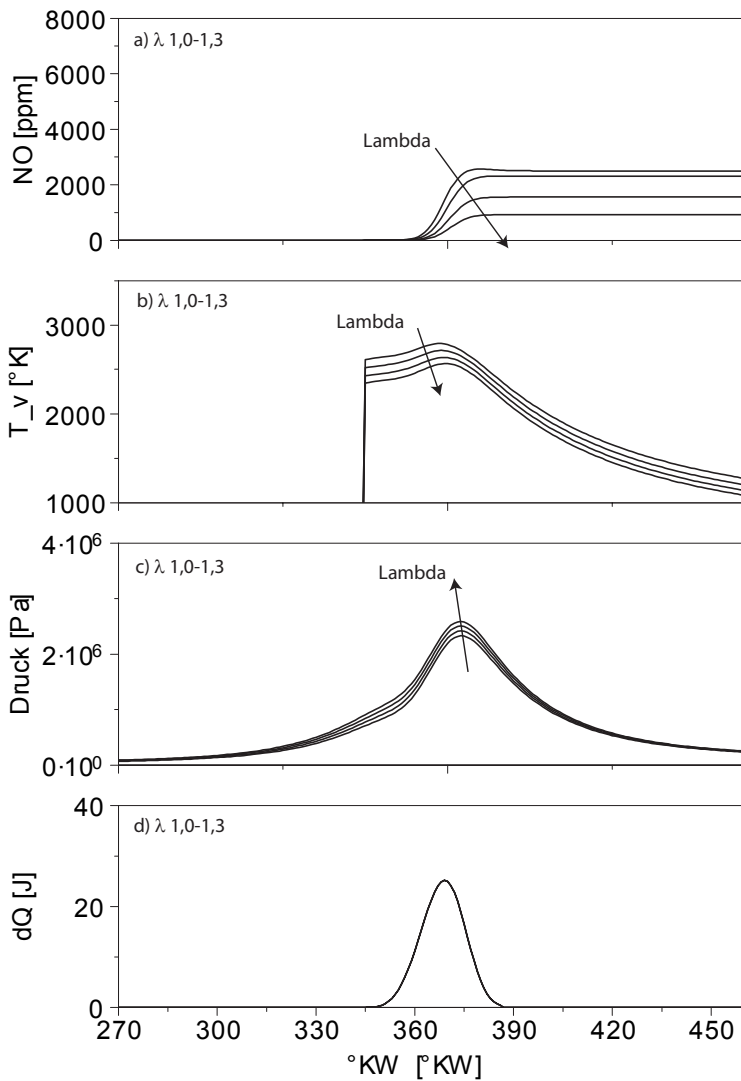


Abbildung 5.11.: Variation des Luft- Kraftstoffverhältnisses im Bereich von $\lambda = 1,0 - 1,3$

5.2.4. Frischladungsmasse

In Abbildung 5.12 ist die Variation der Ladungsmasse dargestellt. In dieser Variation wurde die Ladungsmasse schrittweise um 5% verändert. Es zeigt sich, dass die diese Variation keinen Einfluss auf die Verbrennungstemperatur hat.

Der Druck hat, wie aus Abbildung 4.5 in Kapitel 4.1 ersichtlich einen weitaus geringeren Einfluss auf die Stickoxidbildung als die übrigen Größen. Der Spitzendruck variiert in dieser Simulation um ca. 10 bar. Die Stickoxidkonzentration verändert sich lediglich um 50ppm.

Im Vergleich zu real ausgeführten Motoren mag das Ergebnis überraschen, da z.B. aus Abbildung 5.9 hervorgeht, dass die Stickoxidemission eines Ottomotors über der Last signifikant ansteigt. Dies ist jedoch ebenfalls vor dem Hintergrund des Restgaseinflusses zu sehen. Aus dem simulierten Restgaskennfeld des Motors (vgl. Abbildung 4.14) ergibt sich dagegen, dass der Restgasgehalt über der Last sinkt. Dies erklärt sich aus der geringeren Druckdifferenz zwischen Saugrohr- und Abgasgedruck bei höheren Lasten.

Damit ist der Einfluss der Ladungsmasse auf die Stickoxidbildung bei der ottomotorischen Verbrennung als gering zu bewerten.

5.2.5. Inertgas

Die Variation des Inertgasanteils ist in Abbildung 5.13 dargestellt. Ein Änderung des Inertgasanteils hat eine Änderung der Gesamtladungsmasse zur Folge. Damit ändert sich die Wärmekapazität des Arbeitsgases und führt zu einer Absenkung des Temperaturniveaus.

Demgegenüber steht eine Steigerung des Drucks, der aber, wie schon beschrieben, einen geringeren Einfluss auf die Stickoxidbildung hat als die Temperatur. Im Variationsintervall von 25% des Inertgasanteil kommt es zu einer Änderung der Stickoxidkonzentration von ca. 2800 ppm. Der Inertgasanteil muss daher in jedem Fall in der Modellbildung Berücksichtigung finden.

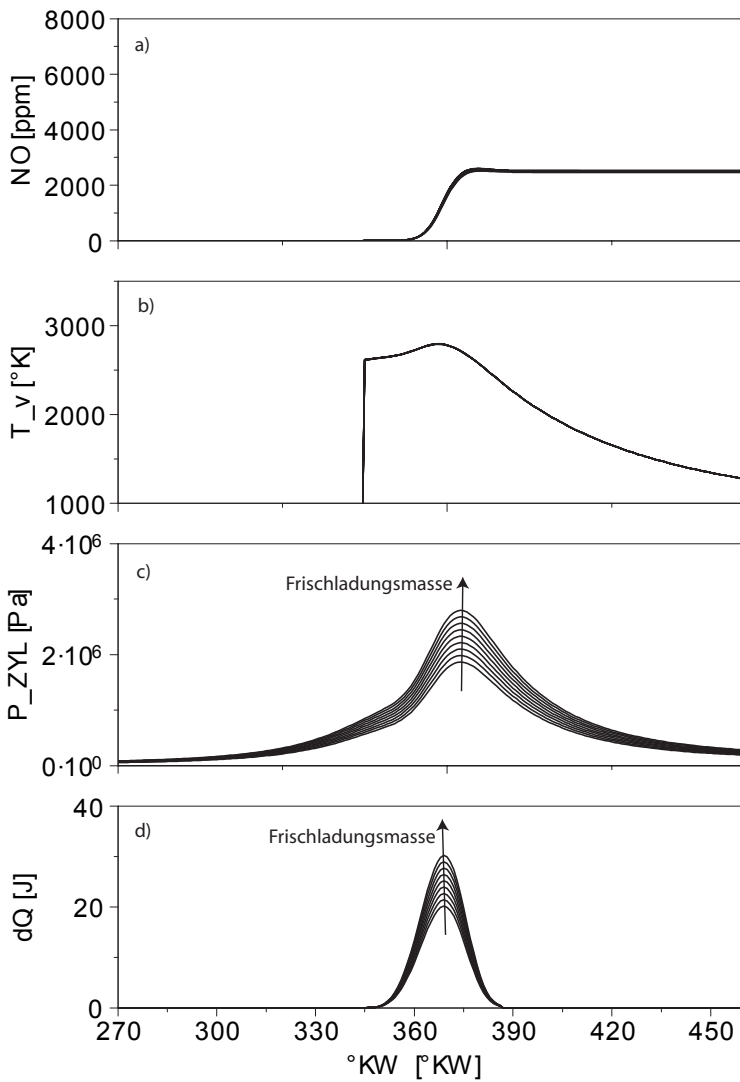


Abbildung 5.12.: Variation der Frischladungsmasse

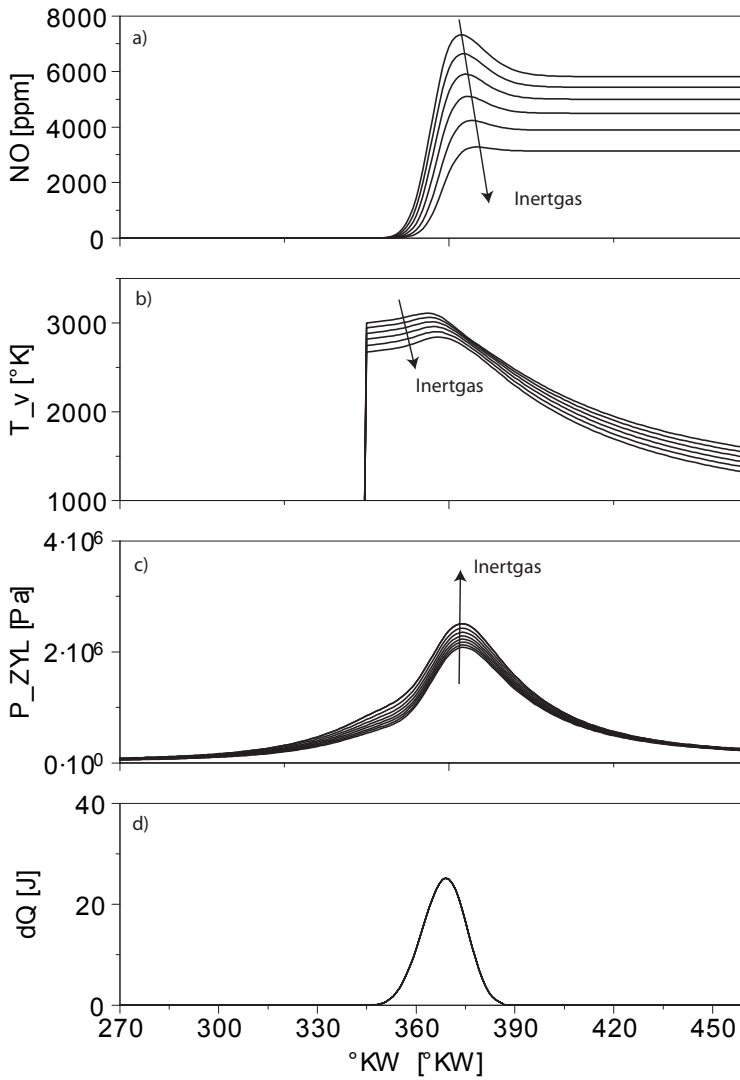


Abbildung 5.13.: Variation des Inertgasanteils

5.2.6. Luftfeuchte

Die Feuchte der Luft beeinflusst nachhaltig die Entstehung von Stickoxiden. Je größer die in die Verbrennung eingebrachte Wassermenge ist, desto kleiner wird die entstehende Stickoxidmenge. Da dieser Zusammenhang bekannt ist, existiert hierfür eine Korrekturvorschrift für den gesetzlich vorgeschriebenen Abgastest. Übereinstimmend mit [Gär01] konnte für die Beeinflussung der Stickoxidbildung durch den Wassergehalte, der in Abbildung 5.14 gefundene Zusammenhang verifiziert werden. Dies, obgleich es sich bei [Gär01] um die Stickoxidemissionen eines Dieselmotors handelt. Hierbei wurde eine Abnahme von ca. 14% pro % Wassermasse festgestellt. Dieser „lineare Reduktionsfaktor“ konnte ebenfalls für die vorliegende Arbeit nachgewiesen werden, wie aus Abbildung 5.14 hervorgeht.

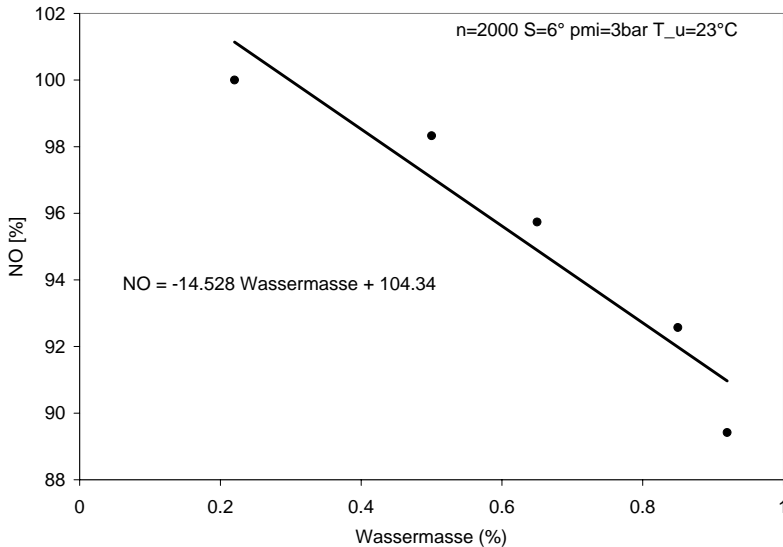


Abbildung 5.14.: Variation der Luftfeuchte

Die Begründung hierfür liegt in der höheren, für die Dissoziation aufzubringenden Energie des Verbrennungsgases und der damit verbundenen Absenkung der Temperatur sowohl von Flammenfront als auch der verbrannten Reaktionszone [Gär01].

5.2.7. Ladungstemperatur

Die Variation der Ladungstemperatur ist simulationstechnisch trivial. Die Veränderung der Starttemperatur bei ES wird selbstverständlich eine Temperaturerhöhung im gleichem Verhältnis zur Folge haben. Dennoch ist dies im realen Motor so nicht darstellbar. Da die Körpertemperatur von Saugrohr und insbesondere Zylinderkopf sowie Zylinder wesentlich über der der Umgebung liegt, richtet sich die Ladungstemperatur im Wesentlichen nach der Bauteiltemperatur. Eine Variation der Ansauglufttemperatur im Bereich von 15 bis 35°C brachte keine klar erkennbare Steigerung der NO Emissionen mit sich. Demgegenüber lässt sich mit einer Beeinflussung der Kühlwassertemperatur eine Änderung des Stickoxidniveaus Niveaus erzielen.

5.3. Statistische Modellbildung

5.3.1. Kenngrößen der Statistik

Zur Beurteilung der Modellqualität werden bekannte Kennwerte der Statistik herangezogen. Diese können vertiefend in [Sac04] und [AVL] nachgelesen werden. Das Bestimmtheitsmaß R^2 stellt hierbei mit Sicherheit eine der bekanntesten Größen dar.

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = \frac{\sum (f_i - \bar{f})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (5.2)$$

SSR : Summe der quadratischen Abweichungen der Modellwerte vom Gesamtmittelwert

SST : Summe der quadratischen Abweichungen der Messwerte vom Gesamtmittelwert

f_i	: i -ter Modellwert
y_i	: i -ter Mo
\bar{y}	: Mittelwert der Messwerte
\bar{f}	: Mittelwert der Modellwerte

Der Wert von R^2 liegt zwischen 0 und 1. Er gibt an, wie genau sich das Modell in die Messwerte einpasst. Dabei werden die Quadratsummen aus den Differenzen der Modellwerte und des Modellmittels sowie der Messwerte und des Messdatenmittels als Quotient zur Beurteilung herangezogen.

Zur Berücksichtigung der Freiheitsgrade und der Anzahl der einbezogenen Messwerte wird das angepasste Bestimmtheitsmaß R^2_{adj} gebildet.

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{SSE/(n-p)}{SST/(n-1)} = 1 - \frac{\sum (y_i - f_i)^2 / (n-p)}{\sum (y_i - \bar{y})^2 / (n-1)} \quad (5.3)$$

SSE	: Summe der quadratischen Abweichungen von Mess- und Modellwerten
n	: Anzahl der Messwerte
p	: Anzahl der unabhängigen Modellkoeffizienten

Der Wert von R^2_{adj} liegt zwischen $-\infty$ und 1 und dient der Beurteilung der Modellberechnungsqualität. Wenn R^2 merklich größer ist als R^2_{adj} so ist die Ordnung der Modellgleichung zu hoch und es liegen nicht ausreichend Messwerte zur Bestimmung der Modellgleichung vor.

Zur Beurteilung der Vorhersagekraft dient die Größe R^2_{pred} . Sie gibt an, mit welcher Sicherheit davon ausgegangen werden kann, dass ein Punkt auf der Modelloberfläche tatsächlich wahr ist.

$$R^2_{pred} = 1 - \frac{PRESS}{SST} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - f_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (5.4)$$

PRESS :Summe der quadratischen Abweichungen von Messwerten und Modellwerten

5.4. Das Polynomiale Echtzeitmodell

5.4.1. Parameterauswahl

Im vorangegangenen Kapitel wurden folgende Einflussparameter näher untersucht:

- Luft-/Kraftstoffverhältnis (λ)
- Inertgasgehalt
- Frischladungsmasse
- Drehzahl
- Verbrennungsschwerpunkt
- Brenndauer

Diese Parameter stellen die wichtigsten Randbedingungen für die ottomotorische Stickoxidbildung dar. Die Vorauswahl dieser Parameter beruht auf den Erkenntnissen aus Kapitel 4 sowie der im Anhang dargestellten gesichteten Literatur. Die Auswahl der Parameter entspricht bekannten motorischen Größen vgl.[PKS02],[Hoh07b].

Im Verlauf der empirischen Modellbildung hat sich gezeigt, dass es Sinn macht, die motorischen Parameter in allgemeingültige Größen zu übersetzen. Dies erleichtert die Anwendbarkeit des Modells bei der Untersuchung anderer Versuchsträger. Daher wurden den Einflussparametern verallgemeinerte Ersatzgrößen zugeordnet. Sie ändern jedoch nicht die grundsätzlichen Einflüsse auf die Stickoxidbildung

In Tabelle 5.1 sind die neuen Parameter mit Einheit sowie deren Ursprung dargestellt.

motorische Größe	allgemeingültige Größe
Luft-/Kraftstoffverhältnis $[-]$	Sauerstoffmasse $[kg/kgBr]$
Inertgasgehalt $[-]$	Inertgasmasse $[kg/kgBr]$
Schwerpunkt $[^{\circ}KW]$	Schwerpunkt $[^{\circ}KW]$
Drehzahl $[min^{-1}]$	Brenndauer $[s]$

Tabelle 5.1.: Verallgemeinerung der Modellparameter

Die Sauerstoffmasse sowie die Inertgasmasse werden ebenso wie die Ausgangsgröße des Modells **NO** $[g/kgBr]$ relativ zur Brennstoffmasse ausgedrückt. Dieser relative Zusammenhang der Massen verbessert die Qualität des polynomialen Modells erheblich.

Zusätzlich zu den oben gelisteten Eingangsparametern wird die Brennstoffmasse in Relation zum Hubvolumen **m_{Br}** $[kg/Vh]$ eingesetzt, um dem Größeneinfluss sowie dem Lastzustand des Brennraums Rechnung zu tragen.

Es hat sich gezeigt, dass der Einfluss dieser Größe durch eine nulldimensionale Simulation, wie sie in den vorangegangenen Kapiteln vorgenommen wurde, nicht abgebildet werden kann, für das empirische NO-Modell aber eine hohe Signifikanz aufweist.

5.4.2. Einfachmodell

Den Einstieg in die Modellbildung bildet ein einfaches Modell. Dieses soll weniger der Anwendung als vielmehr der schrittweisen Darstellung der wichtigsten Abhängigkeiten des polynomialen Modells dienen.

In Abbildung 5.15 sind die Messwerte den Modellwerten des Einfachmodells gegenübergestellt. Das Einfachmodell nutzt folgende Parameter als Eingangsgrößen:

- Sauerstoffmasse $m_{O_2}[kg/kgBr]$
- Inertgasmasse $m_{Igas}[kg/kgBr]$
- Verbrennungsschwerpunkt S $[^{\circ}KW]$

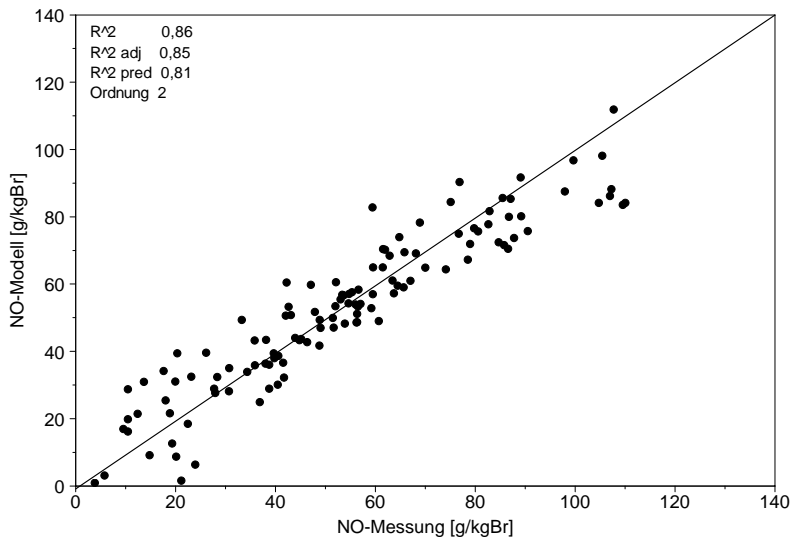


Abbildung 5.15.: Gegenüberstellung Messwerte, Modellwerte – Einfachmodell

Der Wert für R^2 von 0,86 sowie der breite Streubereich der Datenpunkte zeigt, dass zwar eine hohe Signifikanz der Parameter vorliegt, diese aber nicht ausreichen um die unterschiedlichen Betriebspunkte ausreichend genau abzubilden.

In den Formeln (5.6) und (5.7) ist die Modellgleichung des Einfachmodells dargestellt. Gleichung (5.6) bildet den transformierten Modellterm und (5.7) die Rücktransformation. Diese Transformation der Antwortfunktion kann vorgenommen werden, um die Abbildungsqualität zu verbessern. Bei allen weiteren Modellen ist das Ergebnis der Polynomfunktion ebenfalls transformiert.

Da die Wertebereiche der einzelnen Eingangsgrößen stark variieren, werden sie vor der Modellbildung entsprechend (5.5) normiert.

$$x_{i_{normiert}} = \frac{x_i - \bar{x}}{\sqrt{s^2}} \quad (5.5)$$

mit

x_i	:i-ter Messwert
\bar{x}	:Mittelwert über alle Messwerte
s	:Standardabweichung

Für das Polynom des Einfachmodelles ergibt sich nach Berechnung der Koeffizienten und Bestimmung der signifikanten Modellterme folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} NO_{trans} = & a_1 \cdot m_{O_2}^2 + a_2 \cdot S^2 + a_3 \cdot m_{O_2} \cdot S \\ & + a_4 \cdot m_{O_2} + a_5 \cdot m_{Igas} + a_6 \cdot S + C \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$NO = NO_{trans}^{-(2/3)} - 187.248 \quad (5.7)$$

Hierbei nehmen die Koeffizienten des Polynoms folgende Werte an:

$a_1 = 1.6631612077E-05$
 $a_2 = -3.4186967010E-06$
 $a_3 = 1.9055991705E-05$
 $a_4 = -2.6491252622E-05$
 $a_5 = 2.7874060255E-05$
 $a_6 = 3.4489618927E-05$
 $C = 2.6488105375E-04$

Eine Erhöhung der Modellordnung auf 3 würde eine leichte Verbesserung der Modellgüte auf ein R^2 von 0,91 ergeben. Das ist hier aber

nicht dargestellt, weil es keine wirklich gute Modellgüte zur Folge hatte.

In Abbildung 5.16 sind die Werte der Modellkoeffizienten gegenübergestellt. Anhand dieser Abbildung lässt sich die Gewichtung der einzelnen Eingangsparameter ableiten. Es zeigt sich, dass alle drei Parameter einen ähnlichen, linearen Einfluss haben. Einen quadratischen, kleineren Einfluss haben jedoch nur die Sauerstoffmasse und der Schwerpunkt.

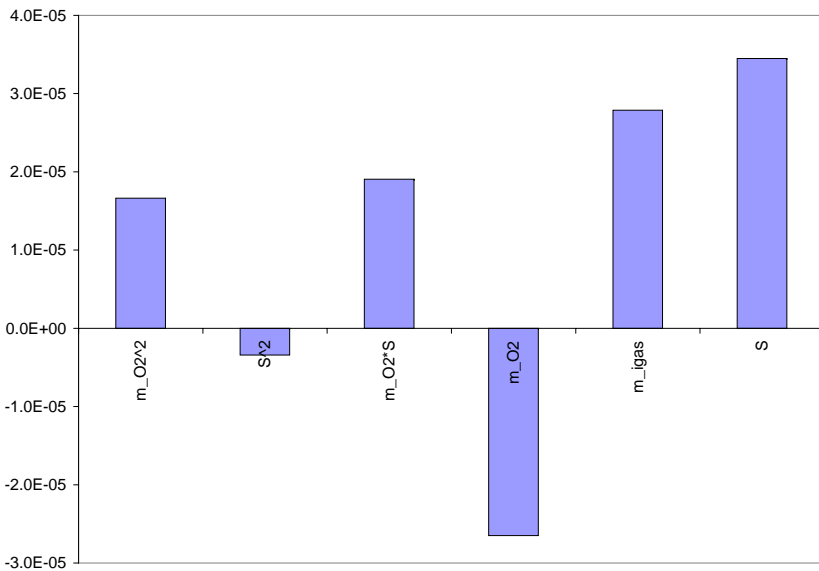


Abbildung 5.16.: Vergleich der Gewichtung der Koeffizienten des Einfachmodells

5.4.3. Hauptmodell

Das Hauptmodell unterscheidet sich vom vorangegangenen Modell durch eine Erhöhung der Modellordnung auf 3 sowie die Einführung der Brenn-

stoffmasse als Modellparameter. Dieser zusätzliche Parameter verbessert die Abbildung des Lasteinflusses, da sich die Restgastemperatur mit der Last ändert. Die Modellparameter des Hauptmodells setzen sich wie folgt zusammen:

- Sauerstoffmasse $m_{O_2}[kg/kgBr]$
- Inertgasmasse $m_{Igas}[kg/kgBr]$
- Verbrennungsschwerpunkt $S [^\circ KW]$
- Brennstoffmasse $m_{Br}[kg/Vh]$

Das Hauptmodell ist a der Modellqualität als Anwendungsmodell geeignet. Die Werte für R^2 und R^2_{adj} liegen beide über 0,95 sowie R^2_{pred} über 0,9. Damit ist die Modellqualität entsprechend [Sac04] und [AVL] sehr gut.

Die Verbesserung der Modellqualität lässt sich auch beim Vergleich von Abbildung 5.15 und 5.17 erkennen. Die Streubreite der Modellwerte des Hauptmodells ist wesentlich geringer als die des Einfachmodells. Besonders im Bereich geringer NO Konzentrationen ergibt sich eine deutliche Verbesserung der Abbildungsqualität.

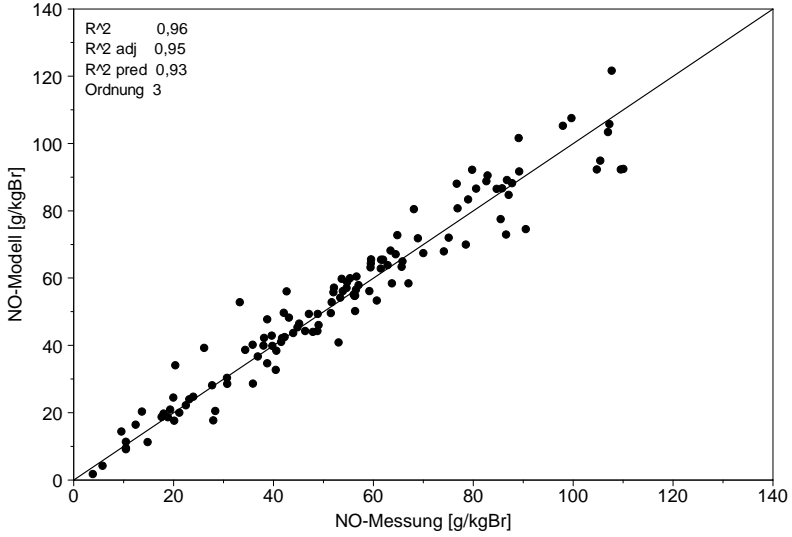


Abbildung 5.17.: Gegenüberstellung Messwerte, Modellwerte – Hauptmodell

Für das Polynom des Hauptmodells ergibt sich nach Berechnung der Koeffizienten und Bestimmung der signifikanten Modellterme folgende Gleichung:

$$\begin{aligned}
 NO_{trans} = & a_1 \cdot m_{O_2}^2 \cdot m_{Igas} + a_2 \cdot m_{O_2}^2 \cdot S + a_3 \cdot m_{O_2} \cdot m_{Igas}^2 \\
 & + a_4 \cdot m_{Igas} \cdot S^2 + a_5 \cdot S \cdot m_{Br}^2 + a_6 \cdot m_{O_2}^2 + a_7 \cdot m_{O_2} \cdot m_{Igas} \\
 & + a_8 \cdot m_{O_2} \cdot S + a_9 \cdot m_{O_2} \cdot m_{Br} + a_{10} \cdot m_{Igas} \cdot m_{Br} + a_{11} \cdot m_{O_2} \\
 & + a_{12} \cdot m_{Igas} + a_{13} \cdot S + a_{14} \cdot m_{Br} + C
 \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$NO = NO_{trans}^{-(1/2)} - 187.248 \quad (5.9)$$

Hierbei nehmen die Koeffizienten des Polynoms folgende Werte an:

$a_1 = -7.6989999963\text{E-}07$
 $a_2 = -1.6485696403\text{E-}06$
 $a_3 = 1.2613980814\text{E-}06$
 $a_4 = -1.3217294646\text{E-}07$
 $a_5 = 3.5051281164\text{E-}07$
 $a_6 = 1.0716490871\text{E-}06$
 $a_7 = -1.5358625259\text{E-}06$
 $a_8 = 4.2077301409\text{E-}06$
 $a_9 = -2.8214103966\text{E-}06$
 $a_{10} = -8.0411713066\text{E-}07$
 $a_{11} = -1.8099950363\text{E-}06$
 $a_{12} = 1.1650134075\text{E-}06$
 $a_{13} = 2.9352860575\text{E-}06$
 $a_{14} = -2.5529150026\text{E-}06$
 $C = 1.5980324485\text{E-}05$

Die Signifikanz der Koeffizienten des Hauptmodells ist in Abbildung 5.18 dargestellt. Der dominante Einfluss von Sauerstoff und Schwerpunkt zeigt sich auch bei diesem Modell. Die Brennstoffmasse tritt nur in Verbindung mit anderen Parametern in Form von Wechselwirkungen auf.

Dies bestätigt die Auswahl der Haupteinflussgrößen aus dem Einfachmodell zeigt aber auch, dass ein Teil der Lastinformation bereits in den Parameterkombinationen des Einfachmodells enthalten ist. Die Parameter des Einfachmodells können die Brennstoffmasse implizit mit einem R^2 von 0,9 abbilden.

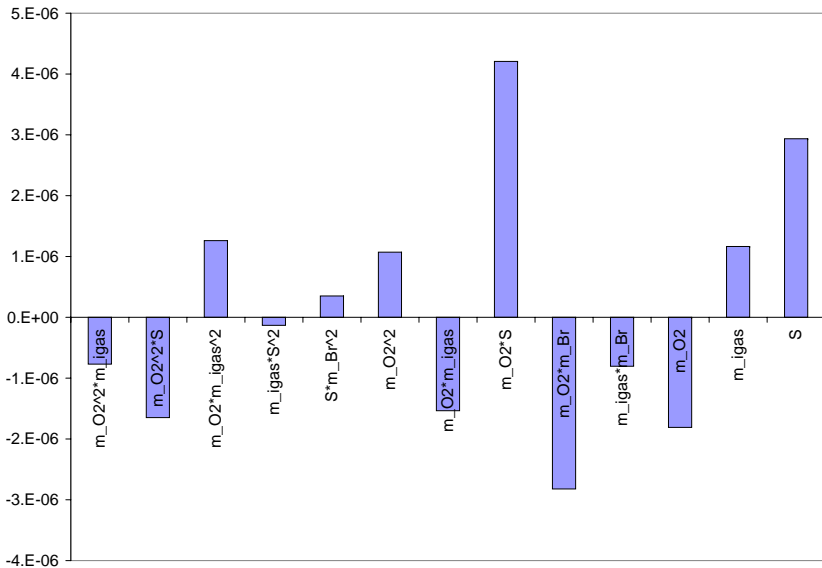


Abbildung 5.18.: Vergleich der Gewichtung der Koeffizienten des Hauptmodells

5.4.4. Erweitertes Hauptmodell

In den vorangegangenen Modellen fand die Drehzahl bzw. Brenndauer noch keine Berücksichtigung. In Kapitel 5.2 wurden diese Parameter als signifikant identifiziert. Daher soll in einem erweiterten Modell der Einfluss der Drehzahl auf die empirische Stickoxidmodellbildung gezeigt werden.

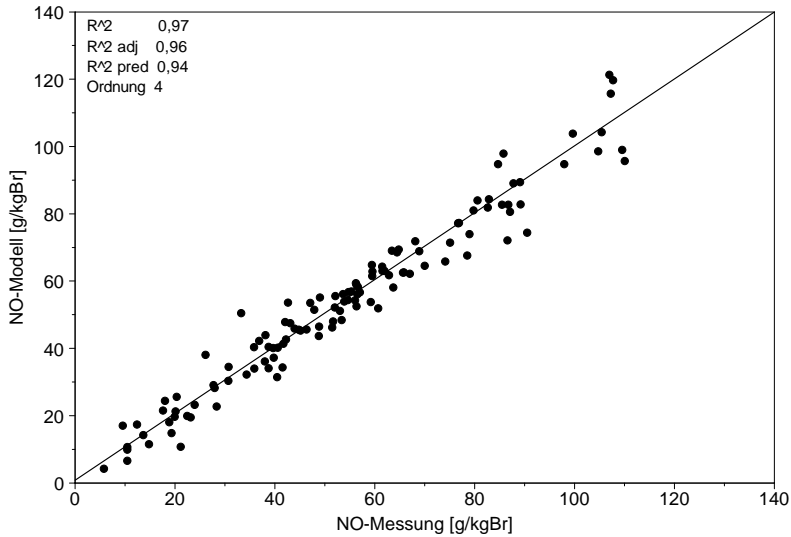


Abbildung 5.19.: Gegenüberstellung Messwerte, Modellwerte – erweitertes Hauptmodell

In Abbildung 5.19 ist die Gegenüberstellung von Mess- und Modellwerten des erweiterten Modells dargestellt. Das Modell besitzt die Modellordnung 4. Die Abbildungsqualität konnte gegenüber dem erweiterten Modell noch verbessert werden.

Der Vergleich der Kenngröße R^2 des Hauptmodells und des erweiterten Modells von 0,95 bzw. 0,97 wirft die Frage auf, weshalb die Abbildung des Hauptmodells ohne Berücksichtigung der Drehzahl schon bei 0,95 sehr gut ist. In Kapitel 5.2 ist der Drehzahl eine erhebliche Bedeutung zugemessen worden.

Dies bedeutet, dass ein Teil der Drehzahlinformation bereits in dem Einfach- sowie dem Hauptmodell enthalten ist. Bildet man mit den Parametern aus dem Hauptmodell die Drehzahl ab, so ergibt dies ein R^2 von 0,84.

Auch die Information über die Brenndauer[KW°] bildet sich implizit durch die Kombination der Parameter zum Teil ab.

Eine größere Allgemeingültigkeit des Modells ist daher von dem erweiterten Modell zu erwarten, da hier alle signifikanten Informationen direkt enthalten sind.

Für das Polynom des erweiterten Hauptmodells ergibt sich nach Berechnung der Koeffizienten und Bestimmung der signifikanten Modellterme folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} NO_{trans} = & a_1 \cdot BD^4 + a_2 \cdot m_{O_2}^2 \cdot BD^2 + a_3 \cdot m_{Igas}^2 \cdot s^2 + a_4 \cdot m_{O_2}^2 \cdot m_{Igas} \\ & + a_5 \cdot m_{O_2}^2 \cdot m_{Br} + a_6 \cdot m_{O_2}^2 \cdot BD + a_7 \cdot m_{O_2} \cdot BD^2 + a_8 \cdot m_{Br} \cdot BD^2 \\ & + a_9 \cdot m_{O_2}^2 + a_{10} \cdot m_{O_2} \cdot S + a_{11} \cdot m_{O_2} \cdot m_{Br} + a_{12} \cdot m_{O_2} \cdot BD + \\ & a_{13} \cdot m_{Br} \cdot BD + a_{14} \cdot m_{O_2} + a_{15} \cdot m_{Igas} + a_{16} \cdot S + C \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$NO = NO_{trans}^{-(1/2)} - 187.248 \quad (5.11)$$

Hierbei nehmen die Koeffizienten des Polynoms folgende Werte an:

$$\begin{aligned} a_1 = & -2.5858276565E-08 \\ a_2 = & -1.8631374556E-07 \\ a_3 = & -1.2406834637E-07 \\ a_4 = & 5.4411585396E-07 \\ a_5 = & 8.7743855571E-07 \\ a_6 = & -1.2582772724E-06 \\ a_7 = & 1.1027410969E-06 \\ a_8 = & -8.9050086566E-07 \\ a_9 = & 1.1237951421E-06 \\ a_{10} = & 2.8387790688E-06 \\ a_{11} = & -2.4374011690E-07 \\ a_{12} = & 9.2906630383E-07 \end{aligned}$$

$a_{13} = 5.4748008861\text{E-}07$
 $a_{14} = -1.7879614901\text{E-}06$
 $a_{15} = 2.2568324676\text{E-}06$
 $a_{16} = 2.9451647899\text{E-}06$
 $C = 1.6799537161\text{E-}05$

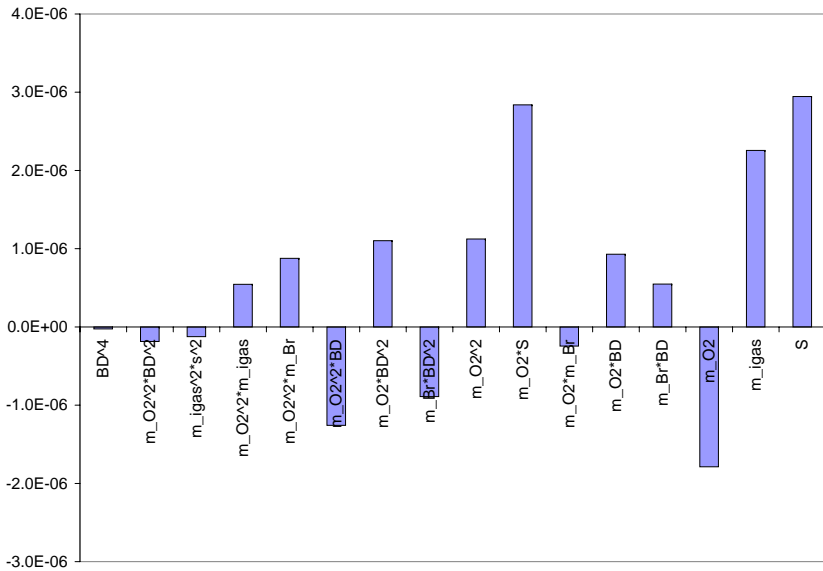


Abbildung 5.20.: Vergleich der Gewichtung der Koeffizienten des erweiterten Hauptmodells

Abbildung 5.20 zeigt die Wichtung der Koeffizienten des erweiterten Hauptmodells. Auffällig ist, dass die Dominanz der Parameter, die bereits im Einfachmodell verwendet wurden erhalten blieb. Die Drehzahl kommt wie auch die Brennstoffmasse erwartungsgemäß nur bei den Wechselwirkungen zum Tragen, da diese Informationen bereits implizit in den Parameterkombinationen enthalten sind.

5.5. Das empirische Stickoxidmodell im dynamischen Motorbetrieb

In den vorangegangenen Abschnitten wurde gezeigt, wie hoch die Qualität der Modelle zur Wiedergabe stationärer Betriebspunkte ist. In Kapitel 1.2 wurde die Anforderungen gestellt das Modell sowohl als Diagnosewerkzeug wie auch als Simulationswerkzeug einsetzen zu können.

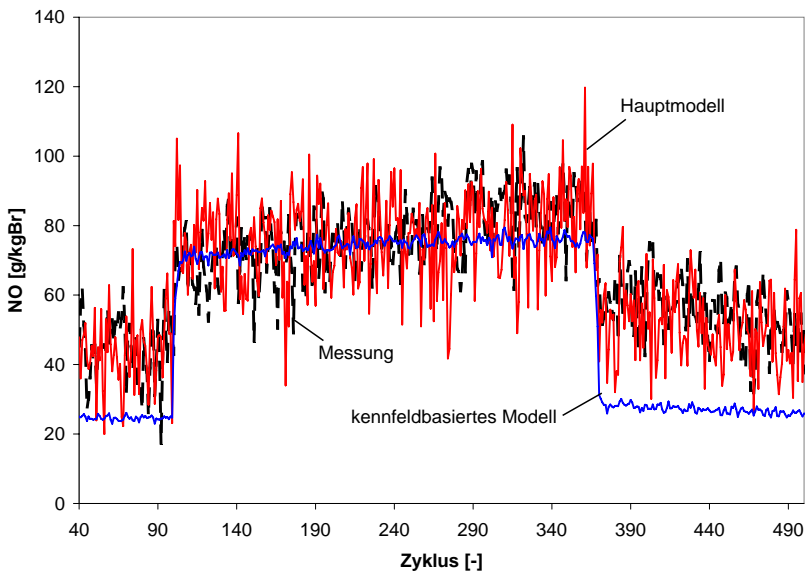


Abbildung 5.21.: Anwendung des Hauptmodells im dynamischen Motorbetrieb

In Abbildung 5.21 sind zeitbasiert die gemessenen Stickoxidkonzentrationen von zwei Lastsprüngen des Versuchsträgers dargestellt. Diese wurden mit dem in Kapitel 3.2.2 beschriebenen Abgasanalysator gemessen. Zusätzlich ist der Verlauf eines einfachen, kennfeldbasierten Stickoxidmodells sowie des Hauptmodells dargestellt. Das kennfeldbasierte Modell nutzt als Eingangsinformationen lediglich Last und Drehzahl. Die Lastsprünge wurden mit

Absicht nicht mit der Serienkalibrierung des Motors gefahren. Daher versagt das kennfeldbasierte Modell bei niedrigen Lasten.

Der Verlauf des Hauptmodells passt sehr gut zu den Messungen und gibt auch die Schwankungsbreite der Stickoxidemissionen in annehmbarer Form wieder. Diese Schwankungen werden im wesentlichen durch den oszillierenden Schwerpunkt sowie das ständig wechselnde Lambda hervorgerufen. Da dies beides Eingangsinformationen des empirischen Stickoxidmodells sind werden diese Einflüsse sehr gut abgebildet.

Damit ist diese Modell auch dann zur Ermittlung der Stickoxidkonzentrationen geeignet, wenn dieses aufgrund von Messungen noch nicht bekannt sind.

So kann am Prüfstand parallel zur Messung eine Simulation die Funktionsfähigkeit des Analysators überwachen, oder in einer Motorsteuerung das Modell als virtueller Sensor eingesetzt werden. Auch die Simulation der Stickoxidemissionen innerhalb einer Kreisprozessrechnung ist möglich, ohne die aufwendige chemische Modellbildung umsetzen zu müssen. Diese ist ohnehin wegen der schwierigen Bestimmung der Ladungstemperatur wenig zuverlässig, wenn das Absolutniveau der Stickoxidemissionen Ziel der Berechnung ist.

Mit diesem abschließenden Test zeigt sich, dass die am Anfang gestellten Forderungen nach einer Nutzungsmöglichkeit hinsichtlich Diagnose der Stickoxidemissionen sowie deren Vorausberechnung erfüllt werden konnten.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Das hier erarbeitete empirische Stickoxidmodell bietet die Möglichkeit, die Stickoxidemissionen eines homogenen Ottomotors sehr gut vorherzusagen oder nachrechnen zu können.

Im Rahmen der Arbeit wurden die grundlegenden Zusammenhänge der thermischen Stickstoffmonoxidbildung erarbeitet. Hierzu wurden die chemischen Vorgänge mittels Gleichgewichtsbrechung und Reaktionskinetik nachgebildet.

Die Stickoxidbildung wurde sowohl in einem thermischen Reaktor wie auch mit Hilfe einer theoretischen Prozessrechnung einer Hubkolbenmaschine simuliert und die Haupteinflussgrößen herausgestellt.

Unter Berücksichtigung der Haupteinflussgrößen wurde unter Verwendung von Messdaten ein empirisches Stickoxidmodell für homogen betriebene Ottomotoren entwickelt.

In weiterführenden Arbeiten sollte die Allgemeingültigkeit des Modells an anderen Versuchsträgern zusätzlich nachgewiesen werden. Darüber hinaus bietet sich die Option über eine Erweiterung für aufgeladene und geschichtet betriebene Motoren nachzudenken.

Eine Ausweitung des Modells auf die Simulation der Stickoxidemissionen im Kaltstart wäre zwar wünschenswert, hält der Autor aber für schwer realisierbar, da ein echter kalter Motor stationär nicht darstellbar ist.

Anhang A.

Anhang

A.1. Prüfstandsaufbau

A.1.1. Versuchsträger und Messtechnikanordnung

Die experimentellen Untersuchungen zu den Einflüssen der motorischen Parameter wie auch der notwendigen Datenbasis zur Erstellung des Echtzeitmodells für die Stickoxidemissionen wurden an einem modifizierten Serienaggregat vom Typ GM Z22YH durchgeführt, der in Abbildung A.1 dargestellt ist. Eine ausführliche Beschreibung des Motors findet sich in [SKP⁺03]. Es handelt sich hierbei um einen 4-Zylinder 4-Takt Ottomotor mit direkter Benzineinspritzung, zentraler Kerzenlage und vier Ventilen pro Zylinder. Sowohl Motorblock als auch Zylinderkopf sind aus Aluminium gefertigt. Ferner verfügt das Saugrohr über Drallklappen, die es ermöglichen, den linken der beiden Zwillingskanäle eines jeden Zylinders stufenlos zu verschließen, um so das Drallniveau zu beeinflussen. Im Folgenden wird in tabellarischer Form auf die technischen Daten sowie die Hauptmerkmale des Motors eingegangen.

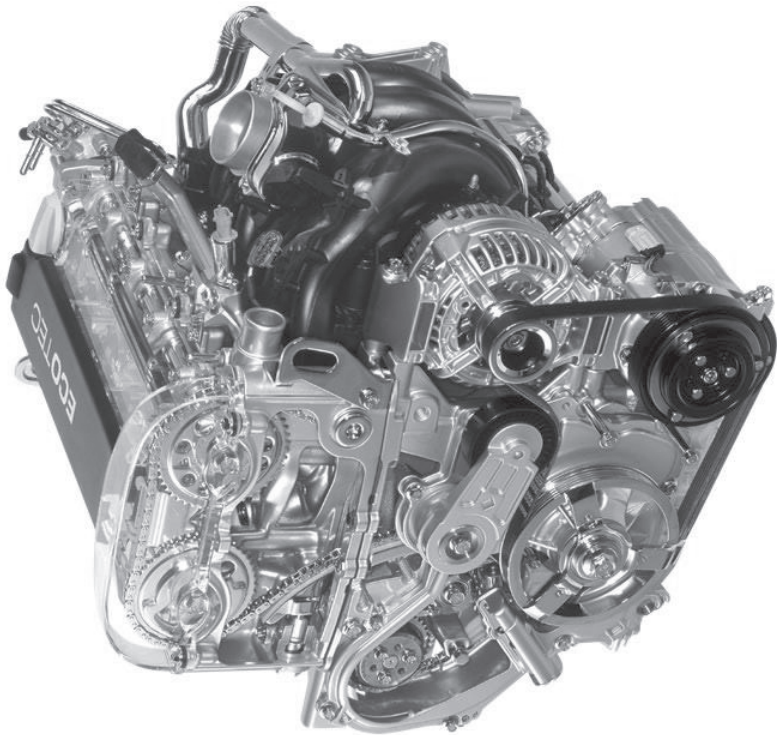


Abbildung A.1.: Schnittmodell des Versuchsträgers

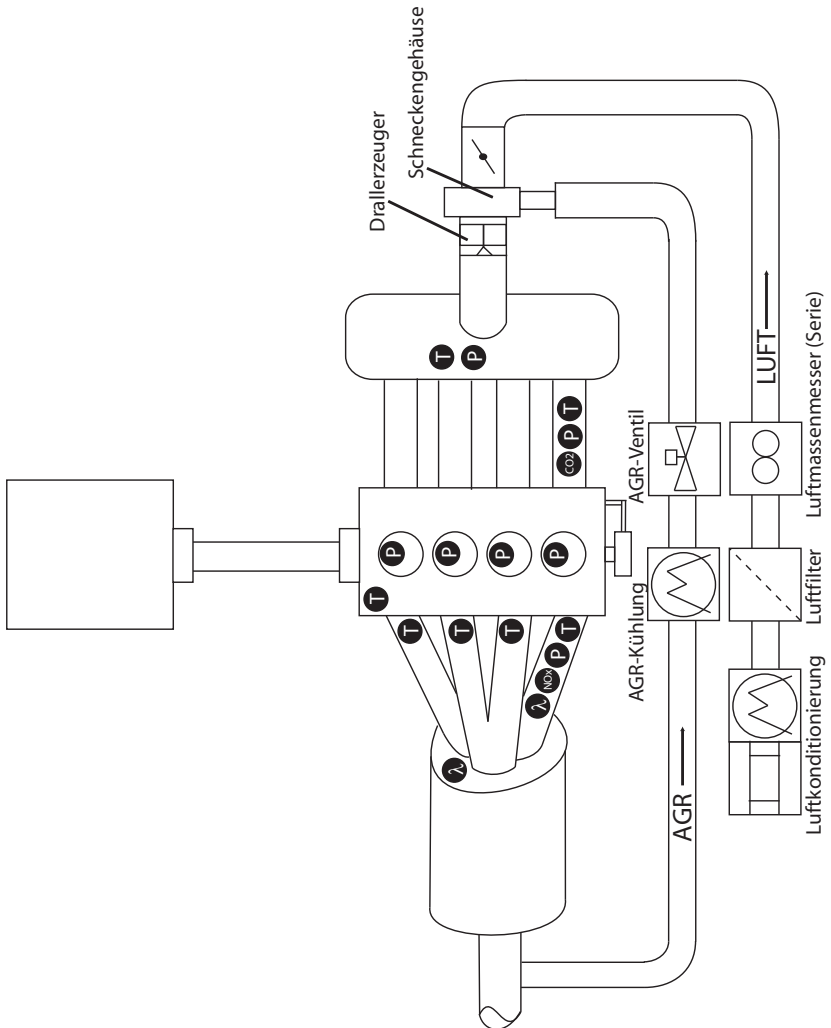


Abbildung A.2.: Messstellenanordnung Prüfstand

Kennwerte	
Max. Drehmoment	220 Nm bei 3800 min^{-1}
Max. Leistung	114 kW bei 5600 min^{-1}
Geometriewerte	
Bohrung [mm]	86
Hub [mm]	94,6
Motorhubvolumen [cm^3]	2198
Verdichtung	12
Pleuellänge [mm]	145,5
Schubstangenverhältnis	0,296
Ventiltrieb	
Ventile	2 Auslass 2 Einlass
Ventildurchmesser A/E [mm]	30,1/35,1
Ventilhub A/E [mm]	10,04
Öffnungsdauer A/E	235 / 240
Spreizung	107 / 120
Technische Ausstattung	
Motorsteuerung	Siemens SIMTEC 81
Kraftstoffqualität	95 / 98
Abgasnachbehandlung	Motornaher 3 Wege Kat
Abgasgrenzwerte	Euro 4

Tabelle A.1.: Kennwert des Versuchsträger GM Z22YH

Modifikationen gegenüber dem Serienaggregat

Kurbelgehäuseentlüftung

Die serienmäßige Kurbelgehäuseentlüftung wurde nicht der Verbrennung zugeführt, um Effekte durch siedende und vernebelte Kohlenwasserstoffe aus dem Ölsumpf zu vermeiden.

Applikationssteuergerät

Um den Verbrennungsablauf beeinflussen zu können, ist der Motor mit einer applizierbaren Motorelektronik ausgerüstet. Diese wird mit INCA 5.x bedient und kann mittels ASAP Protokoll von der Prüfstandsautomatisierung angesprochen werden.

Zylinderdruckindizierung

Der Zylinderkopf wurde an allen 4 Brennraumdächern mit zusätzlichen Zugängen für eine Zylinderdruckindizierung ausgerüstet. Die in den Zylinderkopf integrierten Adapterhülsen weisen einen Innengewindedurchmesser von 10mm auf und durchqueren Nockenwellen- und Kühlraum. Bei der Verwendung von Sensoren mit einer Gewindelänge von 12mm schließt die Druckaufnehmermembran bündig mit dem Brennraum ab.

AGR-Mischstrecke

Die serienmäßige Abgasrückführstrecke wurde modifiziert, da sich zeigte, dass die Nutzung der Serienkonfiguration bei hohen Rückföhrraten zu einer Ungleichverteilung des rückgeföhrten Abgases unter den Zylindern föhrte.

Um eine ausreichend gute Durchmischung des rückgeföhrten Abgases auch bei extremen Rückföhrraten sicherstellen zu können, wurde zwischen Drosselklappengehäuse und Saugrohr ein Mischrohr (siehe A.2 mit Drallkörper installiert. Dieses ist auf Abbildung A.3 dargestellt. Hierbei wird das rückzuföhrnde Abgas in Strömungsrichtung hinter der Drosselklappe über ein Schneckengehäuse zugeföhrt. Ein zusätzlicher Drallkörper sorgt dann für die Durchmischung des Abgases.

Hiermit konnte eine deutliche Verbesserung der AGR-Durchmischung erreicht werden. Eine Ungleichverteilung des rückgeföhrten Abgases war nach der Modifikation mittels CO_2 Messung in den einzelnen Saugrohrkanälen nicht mehr festzustellen.

Nebenaggregate

Die Lastbestimmung der Verbrennungskraftmaschine wird über den indizierten Mitteldruck vorgenommen. Das hat den Vorteil, dass Reibungseinflüsse des Motors den Modellausgang nicht beeinflussen und dass eine Verallgemeinerung gegenüber anderen Verbrennungsmotoren vorgenommen werden kann. Dennoch wurden alle Nebenaggregate (Generator, Klimakompressor, etc.) abgekoppelt, um die Vergleichbarkeit der Eingangsparameter zu Referenzpunkten zu ermöglichen. Die Kühlmittelpumpe wurde serienmäßig betrieben.

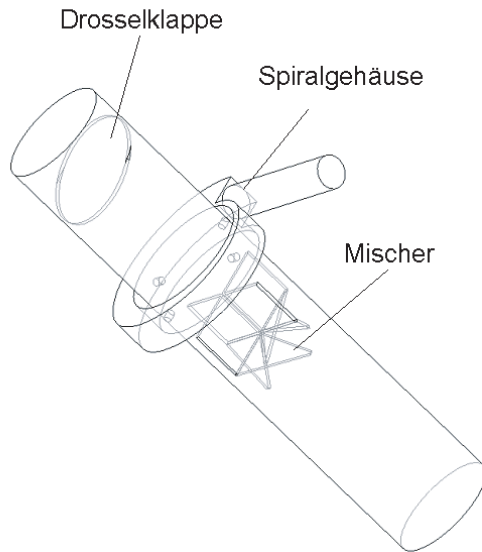


Abbildung A.3.: AGR-Mischer

Öltemperaturkonditionierung

Zur Konditionierung bzw. Begrenzung der Motoröltemperatur wird mittels einer temperaturgeregelten Ölpumpe das Motoröl aus der Ölwanne abge-

pumpt und durch einen Wärmetauscher geleitet. Dessen Höhenniveau liegt unterhalb der Ölwanne. Damit kann erreicht werden, dass der Ölspiegel unabhängig vom Betrieb der Kühlung ist.

A.1.2. Prüfstandstechnik

Prüfstandsautomatisierung

Der Prüfstand wird über das Prüfstandsautomatisierungssystem AVL Puma Open 1.3.2 bedient und geregelt. Dieses System beinhaltet folgende Funktionen, die für die vorliegende Arbeit genutzt wurden:

- Bedienung und Automatisierung des Prüfstandes
- Regelung der Bremse
- Datenerfassung
- Schnittstellen zur Betriebsmesstechnik
 - Erfassungssystem für 0...10V, Temperatursensorik etc.
 - Kraftsoffwaage
- Schnittstellen zur Sondermesstechnik
 - Zylinderdruckindizierung
- Kommunikation zum Motorapplikationssystem
- Kommunikation zur Applikationsautomatisierung Cameo

Zylinderdruckindizierung

Die Zylinderdruckindizierung wird ausführlich in Kapitel 3.1.1 behandelt. Der Übersichtlichkeit halber wird hier die Messtechnik noch einmal tabellarisch wiedergegeben.

Gerät	Typ	Bemerkung
Druckaufnehmer	Kistler 6061B	25pC/bar
Ladungsverstärker	AVL MicroIFEM	4 Kanäle, DC kont., TP 100 kHz
Indiziersystem	AVL Indimaster 670	16 Kanäle, 14bit, IndiCom1.4 PC

Tabelle A.2.: Tabelle der Indiziermesstechnik

Kühlwasserkonditionierung

Um den Einfluss der Kühlwassertemperatur auf die Stickoxidemissionen nachvollziehen zu können, wurde der Kühlwasserkreislauf für die Nutzung einer externen Wasserkonditionieranlage angepasst. Dadurch wurde es möglich, sowohl die Serien-Thermostatsteuerung des Versuchsträgers als auch die externe Wasserkonditionierung durch Umschalten eines 3-Wege-Kugelventils wahlweise zu nutzen. Der Serienthermostat stellt für stationäre Betriebspunkte eine Temperatur von 86°C an der Messtelle ein. Mit Hilfe der externen Kühlwasserkonditionierung ist es möglich, stationäre Temperaturen von 30-110°C im Kühlwasserkreislauf zu realisieren.

Lufttemperaturkonditionierung

Die externe Kühlwasserkonditionierung konnte darüber hinaus genutzt werden, um die Ansauglufttemperatur anzuheben und diesen Einfluss auf die Stickoxidkonzentration zu evaluieren. Hierfür wurde mittels Luft-/Wasserwärmetauscher, welcher in die Ansaugstrecke integriert wurde, die Ansaugluft je nach vorgewählter Temperatur vorgewärmt oder gekühlt. Der Wärmetauscher wurde für derartige Versuche an die externen Wasserkonditionierung angeschlossen.

Luftfeuchtekkonditionierung

Die Konditionierung der Luftfeuchte erfolgte unter Verwendung eines „Burg“ Ultraschallluftbefeuchters, der das Wasser vernebelt. Dieser Nebel wird auf den Wärmetauscher der Lufttemperaturkonditionierung geleitet. Mit einem Abstand von einem Meter hinter dem Wärmetauscher wird mittels

eines Präzisions-Hygrometers die Luftfeuchtigkeit erfasst. Zusammen mit der an der selben Stelle erfassten Temperatur läßt sich der Wassergehalt der Frischluft bestimmen.

A.2. Gleichgewichtsrechnung - verbrannte Zone

	$K_{p,1} = \frac{p_{CO} \cdot \sqrt{p_{O_2}}}{p_{CO_2}}$	$K_{p,2} = \frac{p_{H_2O}}{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}}$	$K_{p,3} = \frac{p_{OH}}{\sqrt{p_{H_2}} \sqrt{p_{O_2}}}$	$K_{p,4} = \frac{p_H}{\sqrt{p_{H_2}}}$
$\Delta a1$	2.424552150E-01	-2.086272015E+00	-4.583653350E-01	1.033584750E+00
$\Delta a2$	-1.061546039E-03	1.818400819E-03	3.659311185E-04	-4.132990100E-04
$\Delta a3$	4.395287975E-07	-5.567935775E-07	-1.502251815E-07	7.320028500E-08
$\Delta a4$	-7.124313310E-11	6.873378010E-11	2.407506450E-11	-7.704925500E-12
$\Delta a5$	3.814344860E-15	-2.930636710E-15	-1.428934585E-15	3.443980750E-16
$\Delta a6$	3.415079838E+04	-2.846484956E+04	4.712324615E+03	2.588018791E+04
$\Delta a7$	9.659674120E+00	6.199185480E+00	4.649423800E+00	6.547535000E-02
	$K_{p,5} = \frac{p_O}{\sqrt{p_{O_2}}}$	$K_{p,6} = \frac{p_N}{\sqrt{p_{N_2}}}$	$K_{p,7} = \frac{p_{NO}}{\sqrt{p_{N_2}} \sqrt{p_{O_2}}}$	
$\Delta a1$	7.131565550E-01	9.396547150E-01	-4.605626000E-02	
$\Delta a2$	-3.554990101E-04	-5.235595500E-04	1.643783885E-04	
$\Delta a3$	6.638444730E-08	1.272921115E-07	-1.122321020E-07	
$\Delta a4$	-5.335064450E-12	-9.074265750E-12	1.985775365E-11	
$\Delta a5$	1.700125460E-16	2.676777200E-16	-1.079614550E-15	
$\Delta a6$	2.983400063E+04	5.659574934E+04	1.099139429E+04	
$\Delta a7$	3.214613650E+00	1.713665690E+00	1.725380450E+00	

Tabelle A.3.: Tabelle mit Koeffizienten nach [Bur01], die in der vorliegenden Arbeit verwandt wurden

Abbildungsverzeichnis

1.1. Relativer Anteil von NO_2 an NO_x über Abgastemperatur und Lambda	4
2.1. Simulation der Stickstoffmonoxidbildung in einem thermischen Reaktor	11
2.2. Vergleich zwischen realem und künstlichem Neuron	22
3.1. Vergleich der unterschiedlichen Auswertalgorithmen für den Heizverlauf	32
3.2. Vergleich der Heizverläufe bei Berechnung mit Thermodynamik1, Thermodynamik2, Zwei-Zonen-Komponentenansatz	35
3.3. Vergleich der Heizverläufe ohne und mit Wärmeübergang nach Bargende / $n=2000$ pmi=3bar AGR=0 $\lambda=1$	37
3.4. Vergleich der Ansätze zur Berechnung der Wandwärmeverluste / $n=2000$ pmi=3bar AGR=0 $\lambda=1$	38
3.5. Ansprechzeit des dynamischen Stickstoffmonoxid Analysators Horiba MEXXA FRC	41
4.1. Verlauf der temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten	49
4.2. Gleichgewichtsrechnung Flussdiagramm	53
4.3. Gleichgewichtsrechnung Lambdavarisation	55
4.4. Gleichgewichtsrechnung Temperaturvariation	56
4.5. Gleichgewichtsrechnung Druckvariation	57
4.6. Zeitverhältnisse in einer Hubkolbenmaschine	59
4.7. Thermischer Reaktor, Temperaturvariation	60
4.8. Thermischer Reaktor, Temperaturvariation mit Drehzahlisolinien im Zeitfenster von 1°KW	61
4.9. Thermischer Reaktor, Temperaturvariation Rückreaktion .	62
4.10. Thermischer Reaktor, Lambdavarisation	63

4.11. Temperaturen bei der Berechnung mit Ein- und Zweizonenmodell	65
4.12. Zwei-Zonen Modell Brennraum	66
4.13. Restgasabhängigkeit der thermischen Stickstoffmonoxidbildung (Simulation)	71
4.14. Restgasmodell für den Versuchsträger - Angaben in % der Zylinderladungsmasse	73
5.1. Referenzbetriebspunkt für die thermochemischen Berechnungen $n = 2000$, $p_{mi} = 3bar$	77
5.2. Vibebrennverlauf im Vergleich zum Referenzbrennverlauf für die thermochemischen Berechnungen	78
5.3. Variation des Verbrennungsschwerpunktes - Simulation . . .	80
5.4. ottomotorische Schwankungen - Druckverläufe - Heizverläufe - Verbrennungsschwerpunkte über Mitteldruck	82
5.5. Brenndauer des Versuchsträger - Serie	83
5.6. Variation der Brenndauer	84
5.7. Brenndauer über Schwerpunkt - Reale Verbrennung	85
5.8. Variation der Drehzahl	87
5.9. Auszug der Stickoxidkonzentration des Versuchsträgers . . .	88
5.10. Variation des Luft- Kraftstoffverhältnisses im Bereich von $\lambda = 0,8 - 1,0$	90
5.11. Variation des Luft- Kraftstoffverhältnisses im Bereich von $\lambda = 1,0 - 1,3$	91
5.12. Variation der Frischladungsmasse	93
5.13. Variation des Inertgasanteils	94
5.14. Variation der Luftfeuchte	95
5.15. Gegenüberstellung Messwerte, Modellwerte – Einfachmodell	100
5.16. Vergleich der Gewichtung der Koeffizienten des Einfachmodells	102
5.17. Gegenüberstellung Messwerte, Modellwerte – Hauptmodell .	104
5.18. Vergleich der Gewichtung der Koeffizienten des Hauptmodells	106
5.19. Gegenüberstellung Messwerte, Modellwerte – erweitertes Hauptmodell	107
5.20. Vergleich der Gewichtung der Koeffizienten des erweiterten Hauptmodells	109
5.21. Anwendung des Hauptmodells im dynamischen Motorbetrieb	110
A.1. Schnittmodell des Versuchsträgers	114

A.2. Messstellenanordnung Prüfstand	115
A.3. AGR-Mischer	118

Tabellenverzeichnis

3.1. Verschiedene Modelle zur Ermittlung der Gaskalorik	33
3.2. Typen der stationären Abgasmesstechnik	40
4.1. Übersicht der Gleichgewichtsreaktionsschemata anderer Ar- beiten	47
5.1. Verallgemeinerung der Modellparameter	99
A.1. Kennwert des Versuchsträger GM Z22YH	116
A.2. Tabelle der Indiziermesstechnik	120
A.3. Tabelle mit Koeffizienten nach [Bur01], die in der vorliegen- den Arbeit verwandt wurden	123

Literaturverzeichnis

- [AVL] AVL CAMEO V3.1.1 Bedienungsanleitung.
- [AVL06] AVL, LIST: *Bedienungsanleitung AVL Fire 8.3*, 2006.
- [Bar91] BARGENDE, MICHAEL: *Ein Gleichungsansatz zur Berechnung der instationären Wandwärmeverluste im Hochdruckteil von Ottomotoren*. Doktorarbeit, TU Darmstadt, 1991.
- [Bar92] BARGENDE, M.: *Ein umfassendes Indizierdatenerfaß- und Auswertesystem*. VDI-Berichtsband, 974, 1992.
- [BCB03] BERNER, HANS-JÜRGEN, MARCO CHIODI und MICHAEL BARGENDE: *Berücksichtigung der Kalorik des Kraftstoffes Erdgas in der Prozessrechnung*. Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, 9:149–172, 2003.
- [BHH⁺04] BORGER, MARC, MICHAEL HAUSSNER, HANS HOUBEN, ARNO MARTO und FRANK PECHHOLD: *Drucksensor-Glühkerze für Dieselmotoren*. MTZ, 11, 2004.
- [BK98] BOSNJAKOVIC, F. und K. F. KNOCH: *Technische thermodynamik Teil1*. Steinkopf Verlag, 1998.
- [Bra91] BRAUSE, RÜDIGER: *Neuronale Netze*. B.G. Teubner Stuttgart, 1991.
- [Bra05] BRAND, DANIEL: *Control-Oriented Modeling of NO Emissions of SI Engines*. Doktorarbeit, Control-Oriented Modeling of NO Emissions of SI Engines, 2005.
- [Bre79] BRETTSCHEIDER, JOHANNES: *Berechnung des Luftverhältnisses von Luft-Kraftstoff – Gemischen und des Einflusses on Meßfehlern auf Lambda*. Bosch technische Berichte, 6:177–186, 1979.

- [BSB⁺07] BREITBACH, HERMANN, JOACHIM SCHOMMERS, RALF BINZ, BERND LINDEMANN, ANDREAS LINGENS und STEPHAN REICHEL: *Brennverfahren und Abgasnachbehandlung im Mercedes-Benz-Bluetec-Konzept*. MTZ, 06, 2007.
- [Bur01] BURCAT, ALEXANDER: *Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion*. 2001.
- [Com06] COMBÉ, TIMO: *Beitrag zur Drehmomentsimulation von Verbrennungsmotoren in Echtzeit*. Doktorarbeit, TU Darmstadt, 2006.
- [DeJ76] DEJAEGER, P.: *Das thermodynamische Gleichgewicht von Verbrennungsgasen unter Berücksichtigung der Rußbildung*. Doktorarbeit, TU Graz, 1976.
- [Fer02] FERZIGER, JOEL H. PERIC, MILOVAN: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 2002.
- [Gär01] GÄRTNER, U.: *Die Simulation der Stickoxid-Bildung in Nutzfahrzeug-Dieselmotoren*. Doktorarbeit, TU Darmstadt, 2001.
- [Gri06] GRILL, MICHAEL: *Objektorientierte Prozessrechnung von Verbrennungsmotoren*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 2006.
- [Hei96] HEIDER, G.: *Schadstoffbildung II - Berechnung der Schadstoffemissionen von Dieselmotoren*. FVV-Forschungsheft 632, 1996.
- [HMO71] HEYWOOD, JOHN B., STEVEN M. MATHEWS und BARBARA OWEN: *Predictions of Nitric Oxide Concentrations in a Spark-Ignition Engine Compared with Exhaust Measurements*. SAE 710011, 1971.
- [Hoh80] HOHENBERG, GÜNTER: *Experimentelle Erfassung der Wandwärme in Kolbenmotoren*. Doktorarbeit, Habilitationsschrift Technische Universität Graz, 1980.
- [Hoh82] HOHENBERG, GÜNTER: *Der Verbrennungsverlauf - ein Weg zur Beurteilung des motorischen Prozesses*. In: *Wiener Motorsymposium*, 1982.

- [Hoh07a] HOHENBERG, PROF. DR.-ING. G: *Sinnhaftigkeit der CO₂-Diskussion*. In: *Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstages von Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher*, 2007.
- [Hoh07b] HOHENBERG, PROF. DR.-ING. G.: *Verbrennungskraftmaschinen I&II - Vorlesungsumdruck*. TU Darmstadt FG Verbrennungskraftmaschinen, 2007.
- [Jes02] JESCHKE, JENS: *Konzeption und Erprobung eines zylinderdruckbasierten Motormanagements für PKW-Dieselmotoren*. Doktorarbeit, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2002.
- [Jus38] JUSTI, E.: *Spezifische Wärme, Enthalpie, Entropie und Dissoziation technischer Gase*,. Springer Verlag, 1938.
- [KBSS02] KÖHLER, U., M. BARGENDE, F. SCHWARZ und U. SPICHER: *Entwicklung eines allgemeingültigen Restgasmodells für Verbrennungsmotoren*. Technischer Bericht, FVV, 2002.
- [Kol90] KOLAR, JÖRGEN: *Stickstoffoxide und Luftreinhalung*. Springer Verlag, 1990.
- [Lar05] LARINK, JÖRG: *Zylinderdruckbasierte Auflade- und Abgasrückführregelung für PKW-Dieselmotoren*. Doktorarbeit, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2005.
- [LHK70] LAVOIE, GEORGE A., JOHN B. HEYWOOD und JAMES C. KECK: *Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion Engines*. Combustion Science and Technology, 1:313–326, 1970.
- [Lin02] LINDE: *EG-Sicherheitsdatenblatt nach TRGS 220 - Kohlenmonoxid*. Technischer Bericht, Linde, 2002.
- [May84] MAY, H.: *Vorlesungsumdruck Chemische Thermodynamik*. Universität Kaiserslautern, 1984.
- [MSSO04] MERKER, SCHWARZ, STIESCH und OTTO: *Verbrennungsmotoren*. Teubner, 2004.

- [Nit92] NITSCHKE, ECKHARD: *Stationäre und instationäre Messung und Berechnung der Abgaszusammensetzung am Ottomotor*. Doktorarbeit, Technische Hochschule Darmstadt, 1992.
- [Pap91] PAPULA, LOTHAR: *Mathematik für Ingenieure 1*. Vieweg, 1991.
- [PG68] P.EYZAT und J. C. GUIBET: *A New Look at Nitrogen Oxides Formation in Internal Combustion Engines*. SAE-Paper, 680124, 1968.
- [PH73] PATTAS, KONSTANTIN und GÜNTHER HAFNER: *Stickoxidbildung bei der Ottomotorischen Verbrennung*. MTZ, Jahrgang 34 Ausgabe 12:397 to 404, 1973.
- [PKS02] PISCHINGER, R., M. KLELL und T. SAMS: *Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine*. Springer Verlag, 2002.
- [Rie99] RIEGLER, UDO GÜNTHER: *Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 1999.
- [Sac04] SACHS, LOTHAR: *Angewandte Statistik*. Springer Verlag, 2004.
- [Sch75] SCHRÖER, A.: *Analytische Erfassung der Veränderung der NO_x-Emission von Dieselmotoren bei veränderten Betriebsbedingungen des Motors*. Technischer Bericht, FVV Forschungsbericht 122, 1975.
- [SGW⁺06] STEINFELD, HENNING, PIERRE GERBER, TOM WASSENAAR, VINCENT CASTEL, MAURICIO ROSALES und CEES DE HAAN: *livestock's long shadow*. Technischer Bericht, FAO - United Nations, 2006.
- [SHK07] SATTELMAYER, T., M. HAIBEL und R. KATHAN: *Skriptum zur Vorlesung Thermodynamik II*. Lehrstuhl für Thermodynamik TU München, 2007.
- [SKP⁺03] SCHNITTIGER, WALTER, ACHIM KÖNIGSTEIN, STEFAN PRITZE, MANFRED PÖPPERL, PETER ROTHENBERGER und MATHIAS SAMSTAG: *2.2 Direct Ecotec Neuer Ottomotor mit Direkteinspritzung von Opel*. MTZ Motortechnische Zeitschrift, 12:1010–1019, 2003.

- [Sti99] STIESCH, GUNNAR: *Phänomenologisches Multizonen-Modell der Verbrennung und Schadstoffbildung im Dieselmotor*. Doktorarbeit, Universität Hannover, 1999.
- [TA99] TRAVER und ATKINSON: *Neural Network-based Diesel Engine Emissions Prediction Using In-Cylinder Combustion Pressure*. SAE 1999-01-1532, 1999.
- [Vib70] VIBE, I. I.: *Brennverlauf und Kreisprozeß von Verbrennungsmotoren*. VEB Verlag Technik Berlin, 1970.
- [Vog75] VOGT, RAINER: *Beitrag zur rechnerischen Erfassung der Stickoxidbildung im Dieselmotor*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 1975.
- [Vog89] VOGEL, HELMUT: *Physik*. Springer Verlag, ISBN 3-540-51196-2, 1989.
- [Wag99] WAGNER, CHRISTOPH: *Untersuchung der Abgasrückführung*. Doktorarbeit, TU Darmstadt, 1999.
- [Web01] WEBERBAUER, FRANK: *Thermodynamische Analyse und Vorausberechnung der Stickoxidemissionen von direkteinspritzenden Ottomotoren*. Doktorarbeit, TU München, 2001.
- [Wen06] WENZEL, SEBASTIAN PAUL: *Modellierung der Ruß und NO_x-Emissionen des Dieselmotors*. Doktorarbeit, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2006.
- [WG02] WIMMER, ANDREAS und JOSEF GLASER: *Indizieren am Verbrennungsmotor - Anwenderhandbuch*. AVL, 2002.
- [WMD01] WARNATZ, J., U. MAAS und R.W. DIBBLE: *Verbrennung*. Springer Verlag, 2001.
- [Wos70] WOSCHNI, GERHARD: *Die Berechnung der Wandverluste und der thermischen Belastung der Bauteile von Dieselmotoren*. MTZ, 31. Jahrgang:491 to 499, 1970.
- [Zac66] ZACHARIAS, FRIEDMANN: *Analytische Darstellung der thermodynamischen Eigenschaften von Verbrennungsgasen*. Doktorarbeit, Technische Universität Berlin, 1966.

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen

A, B, \dots	Reaktanten und Edukte
C	Kohlenstoff atomar
CH	Kohlenwasserstoffradikal
CO	Kohlenmonoxid
CO_2	Kohlendioxid
H	Wasserstoff atomar
H_2	Wasserstoff
H_2O	Wasser
HCN	Blausäure
HNO_3	Salpetersäure
KNN	Künstlich Neuronales Netz
N	Stickstoff atomar
N_2	Stickstoff
N_2O	Distickstoffmonoxid
NO	Stickstoffmonoxid
NO_2	Stickstoffdioxid
O	Sauerstoff atomar
O_2	Sauerstoff
OH	Hydroxyl

Formelzeichen

$[CO_2]$	Kohlendioxidkonzentration molar [pph]
α	Wärmeübergangskoeffizient [W/m^2K]
κ	Polytropenexponent [-]
λ	Luftverhältnis [-]

ν	Molzahl [mol]
φ	Kurbelwinkel [$^{\circ}$ KW]
A	Sto[-]
A	Zylinderinnenfläche [m^3]
B	Temperaturfunktion[-]
b	Temperaturbeiwert [-]
cv	Wärmekapazität $V=\text{const}$ [$kJ/kg^{\circ}K$]
E_a	Aktivierungsenergie [J/mol]
k	Geschwindigkeitskonstante [$cm^3/mols$]
K_c	Gleichgewichtskonstante (molar) [-]
K_p	Gleichgewichtskonstante (partialdruck) [-]
m	Formparameter (Vibe) [-]
m	Masse[kg]
p	Druck [Pa]
Q	Wärme [J]
T	Temperatur [$^{\circ}K$]
T	Zylindertemperatur [$^{\circ}K$]
t	Zeit [s]
U	innere Energie [J]
V	Zylindervolumen [m^3]
Indizes	
ABG	Abgas
AGR	Abgasrückführung
ANS	Saugrohr
AVS	Auslassventil schliesst
BB	Brennbeginn
BD	Brenndauer
Br	Brennstoff
EV	Einlassventil öffnet
f	Vorwärtsreaktion
i	i-ter Wert
$Inertgas$	Inertgas

KA	Auslasskanal
KE	Einlasskanal
L_{min}	minimaler Luftbedarf
$mess$	Messwert
n	Nullline
r	Rückwärtsreaktion
RG	Restgas
UZ	unverbrannte Zone
VZ	verbrannte Zone
w	Zylinderwand
w^T	transponierte Matrix w
Zyl	Zylinder
Konstanten	
R_m	universelle Gaskonstante molar 8314,3 [J/k mol]